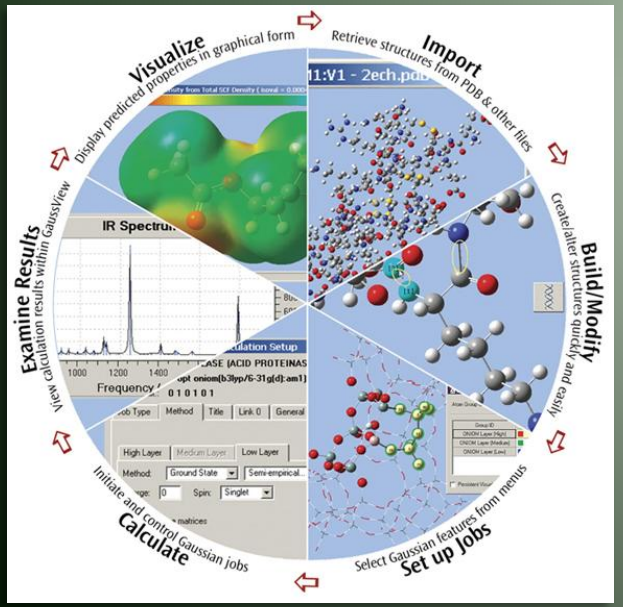
IIM-UNAM PCeIM
Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales

FISICO QUÍMICA COMPUTACIONAL

USO DE SOFTWARE PARA REALIZAR CÁLCULOS DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA



Dr. Alejandro Valderrama
Expositor

CONACYT

Facultad de Ciencias

2018

Cómputo Académico UNAM
DGTIC

QUANTUM ESPRESSO

DIRECCIÓN GENERAL DE CÓMPUTO Y DE TECNOLOGÍAS DE INFORMACIÓN Y COMUNICACIÓN

DESCARGO DE RESPONSABILIDAD

- Las presentes láminas o diapositivas han sido elaboradas de manera original por Alejandro Valderrama para la impartición del curso de Temas Selectos de Físico Química Computacional II 2018-1 de la Facultad de Ciencias.
- La información presentada ha sido tomada de múltiples fuentes, algunas referidas en la bibliografía del curso y otras de información disponible en la Internet de dominio público.
- Algunos párrafos pueden ser tomados textuales o traducidos, o algunas fotos reproducidas de manera directa o indirecta, en todos los casos se ha realizado un trabajo de recopilación, organización y edición original.
- En ningún momento el realizador pretende adjudicarse la autoría de ninguna de las partes componentes de este material didáctico; más sin embargo, sí la autoría y propiedad de la composición como material didáctico terminado o en desarrollo.

Declaración Americana de los Derechos y Deberes del Hombre.

Artículo 4°. *Derecho de libertad investigación, opinión, expresión y difusión.*

- "Toda persona tiene derecho a la libertad de investigación, de opinión y de expresión y difusión del pensamiento por cualquier medio"

TEMARIO

SECCIÓN 1

1. Introducción al software de simulación molecular.
2. Manejo de directorios y aplicaciones.
3. Instalación de software.
4. Manejo de Archivos.
5. Coordenadas de Fullerenos.
6. Hojas de grafeno.

SECCIÓN 2

1. Introducción a Gaussian View 5.0.
2. Construcción de una estructura.
3. Distribuciones de carga.
4. Orbitales : Superficies y contornos.
5. Modos de vibración.

SECCIÓN 3

1. Simulación de cristales.
2. Bases de datos de cristalografía.
3. Visualización en Jmol.
4. Archivos .cif.

SECCIÓN 4

1. Introducción a Quantum Espresso v5.0.2.
2. Archivos de entrada y salida.
3. Instalación de XCrysden.
4. Visualización.

SECCIÓN 5

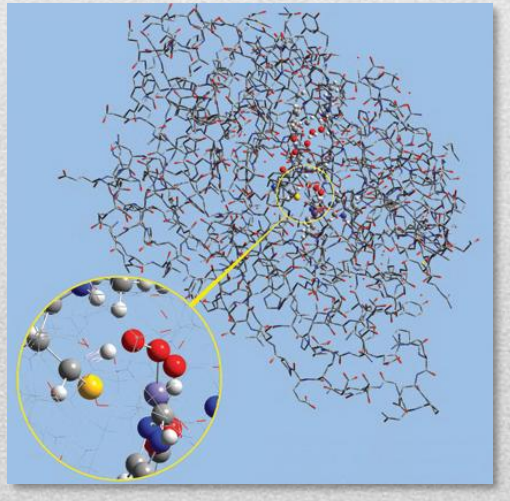
1. Introducción a Quantum Espresso v5.0.2.
2. Archivos de entrada y salida.
3. Instalación de XCrysden.
4. Visualización.

NOTA: Las sesiones durarán hasta 3 hrs., los temas quedan sujetos a cambios según se requiera durante el desarrollo del curso.

SECCIÓN 1

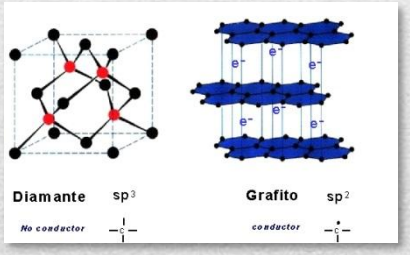
CONTENIDO

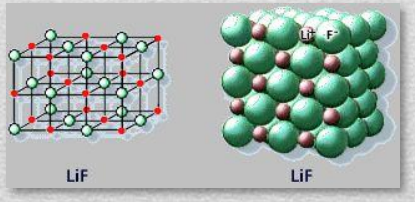
1. Introducción al software de simulación molecular.
2. Manejo directorios y aplicaciones.



1. Introducción al software de simulación molecular.

- ✓ **Importar, construir y examinar estructuras moleculares en 3D.**
- ✓ **Añadir átomos de hidrógeno de forma automática con una excelente precisión y fiabilidad.**
- ✓ **Visualizar los orbitales moleculares, cargas atómicas y otras superficies.**
- ✓ **Especificar características no estándar de moléculas conocidas (isótopos).**
- ✓ **Optimizar las coordenadas geométricas de una molécula.**
- ✓ **Determinar los modos y las frecuencias de vibración a diferentes temperaturas.**
- ✓ **Encontrar energías de enlace y de adsorción.**
- ✓ **Modelar cristales para analizar sus características.**
- ✓ **Realizar cálculos de estructura molecular mediante métodos ab initio.**
- ✓ **Calcular una amplia variedad de parámetros físico-químicos.**



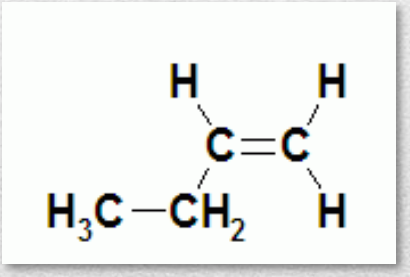


La interacción electromagnética explica la estructura cristalina

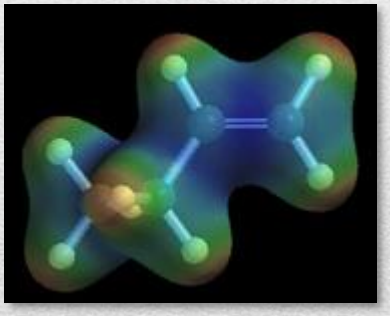
EJEMPLOS

A) Buteno

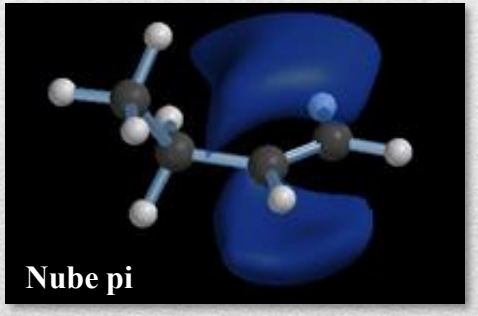
Fórmula global: C_nH_{2n}



Representación Clásica



Representación 3D
Distribución de Carga

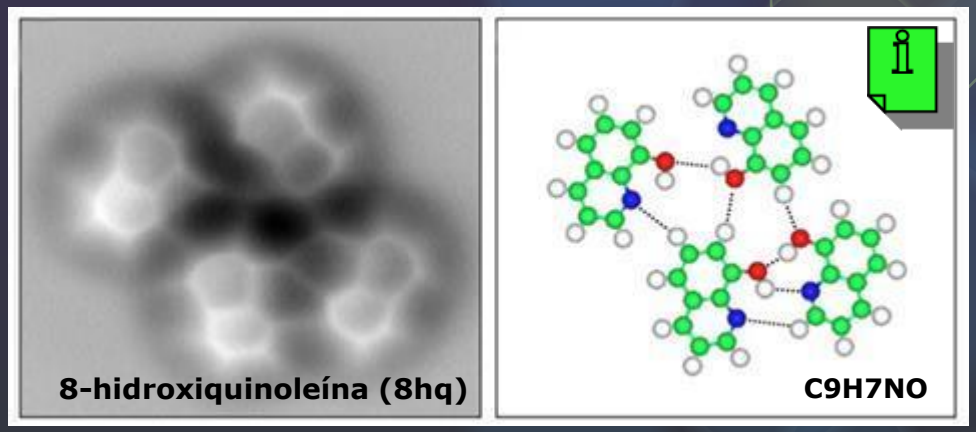


Superficie de Potencial
Electrostático Molecular

Grupo Funcional	Hibridación del C	Geometría del C	Fórmula Global	Nomenclatura
Alqueno	sp^2	trigonal plana	C_nH_{2n}	R-eno

Imágenes de enlaces de hidrógeno

"La observación directa de los enlaces de hidrógeno es consistente con el concepto que aprendimos: un átomo de hidrógeno electropositivo que puentea entre dos especies electro-negativas X e Y en la forma designada de X-H ··· Y"



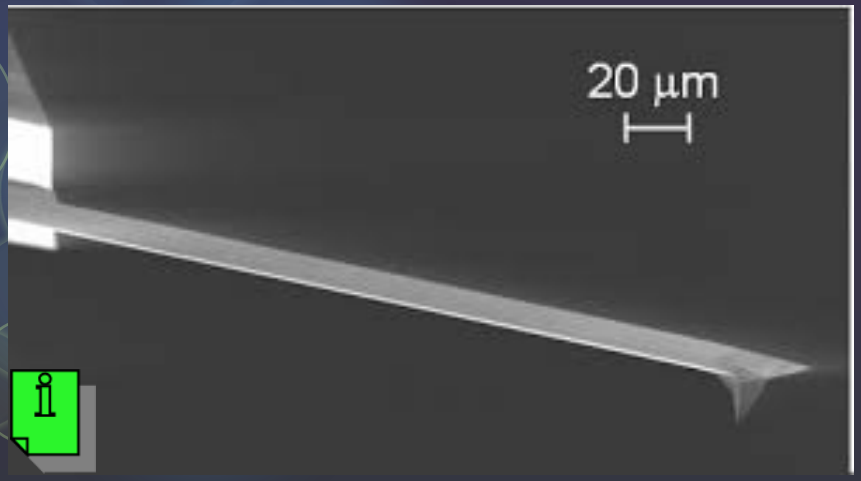
grupo OH en carbono número 8

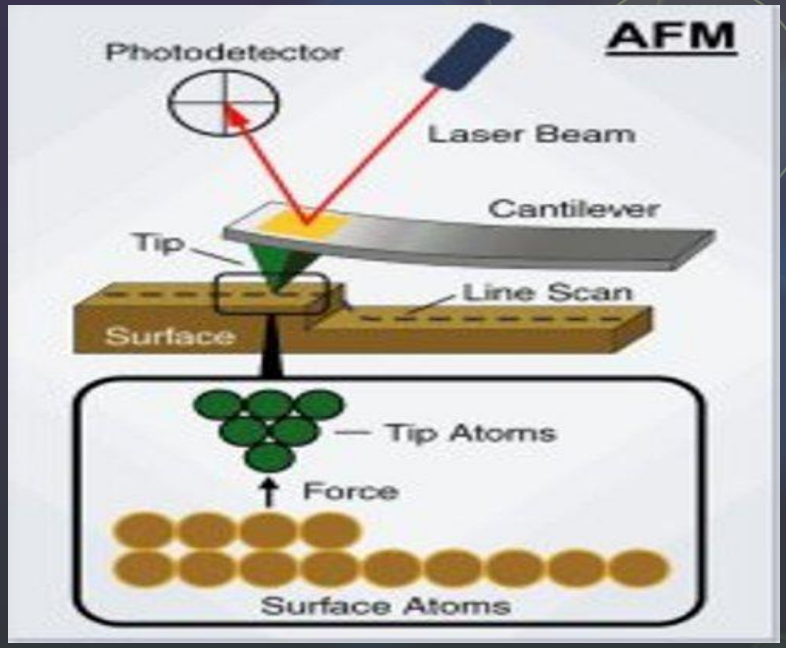
MFA se puede usar en dos modos:

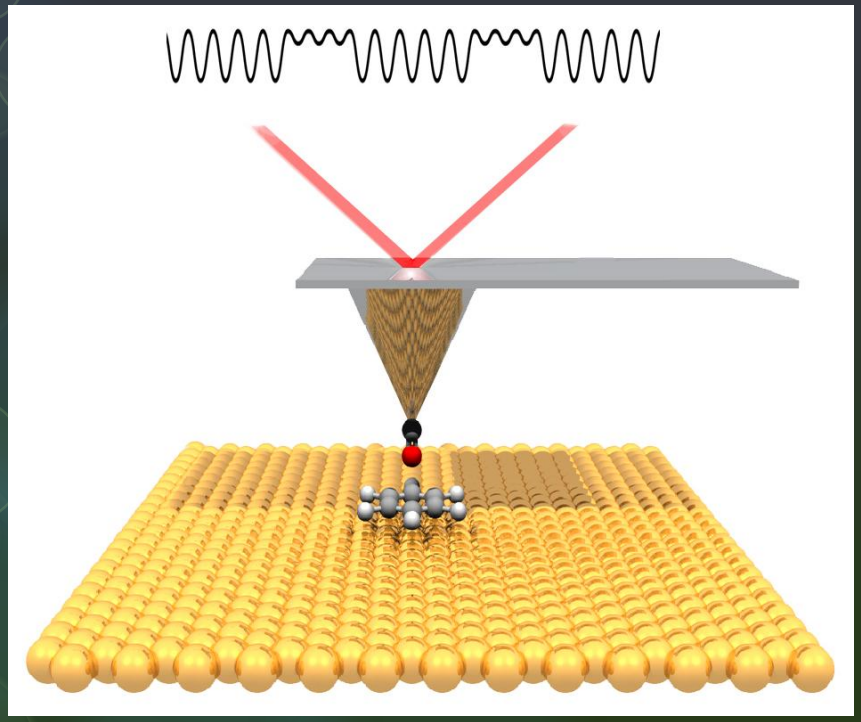
- **De contacto:** la punta (*cantilever*) de silicio o nitruro de silicio se arrastra sobre una superficie. La deformación causada en la punta por la fuerza repulsiva de la superficie se procesa entonces para crear una imagen de la superficie.

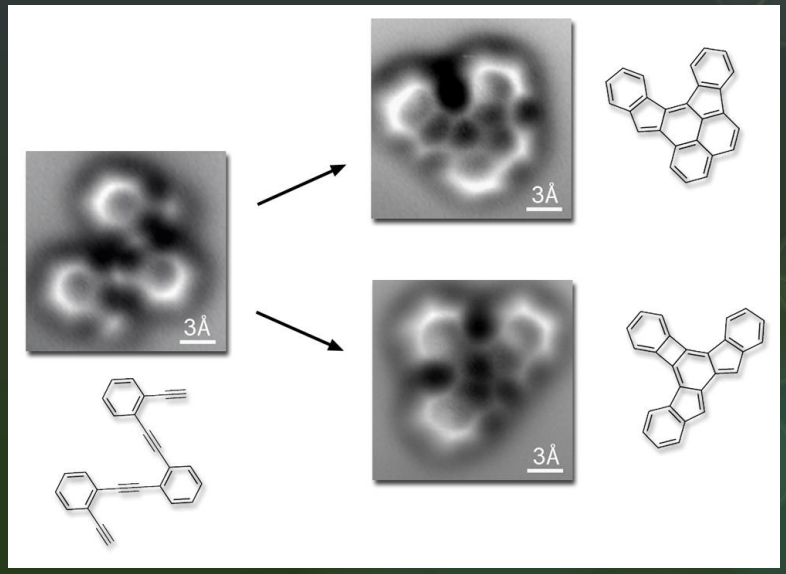
- **Sin contacto:** la punta se hace oscilar a una frecuencia de resonancia justo por encima de la superficie. Las débiles fuerzas de van der Waals de la superficie disminuyen la frecuencia de resonancia de la punta. Este cambio de frecuencia es procesado para revelar la imagen con precisión atómica.

Los enlaces de hidrógeno son fundamentales para las moléculas más importantes en la naturaleza. Son responsables de mantener juntas las dos hebras de la doble hélice de ADN y muchas enzimas catalizan reacciones haciendo uso de ellas.


20 µm

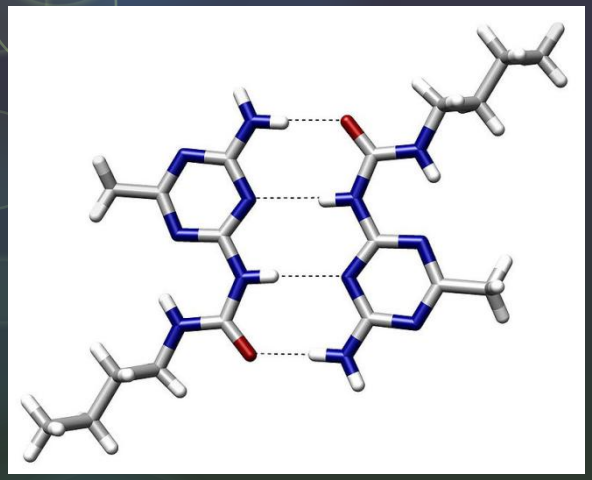

AFM
Photodetector
Laser Beam
Cantilever
Tip
Line Scan
Surface
Tip Atoms
Force
Surface Atoms

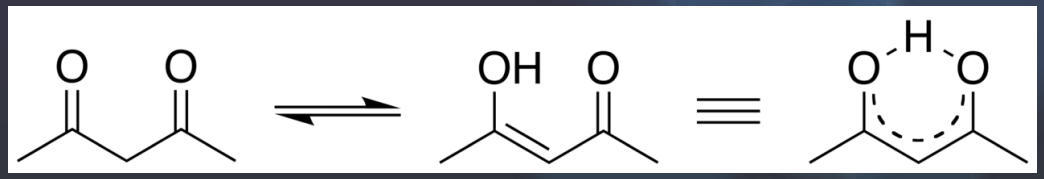



3Å
3Å
3Å

Enlaces de hidrógeno

Estos enlaces intermoleculares pueden formarse cuando un hidrógeno que está unido a un átomo altamente electronegativo interactúa con otro átomo cargado negativamente.





Enlace de Hidrógeno intramolecular en la acetilacetona

La "naturaleza de un enlace de hidrógeno todavía se debate". Durante mucho tiempo se ha considerado una interacción electrostática, pero recientemente se ha sugerido que tiene características de unión química como se evidencia mediante experimentos de difracción de rayos X.

Así como los químicos usan la RMN y la espectrometría de masas todos los días para examinar las moléculas, un día el AFM será una herramienta de rutina también.

Aunque la preparación de la muestra es compleja y la necesidad de personal capacitado puede hacerla menos atractiva.

Pero si estas limitaciones pueden ser superadas, pocos químicos querrían perder la oportunidad de ver las moléculas que manipulan todos los días.

B) Pentaceno

Científicos del centro de investigación de IBM en Zúrich junto al microscopio de fuerzas atómicas.- IBM

Los átomos que forman una molécula se han logrado visualizar bien a través de un Microscopio de Fuerzas Atómicas (AFM) del Laboratorio IBM en Zúrich (Suiza) .

La molécula es el pentaceno ($C_{22}H_{14}$), consistente en cinco anillos de benceno enlazados formando una cadena aromática.

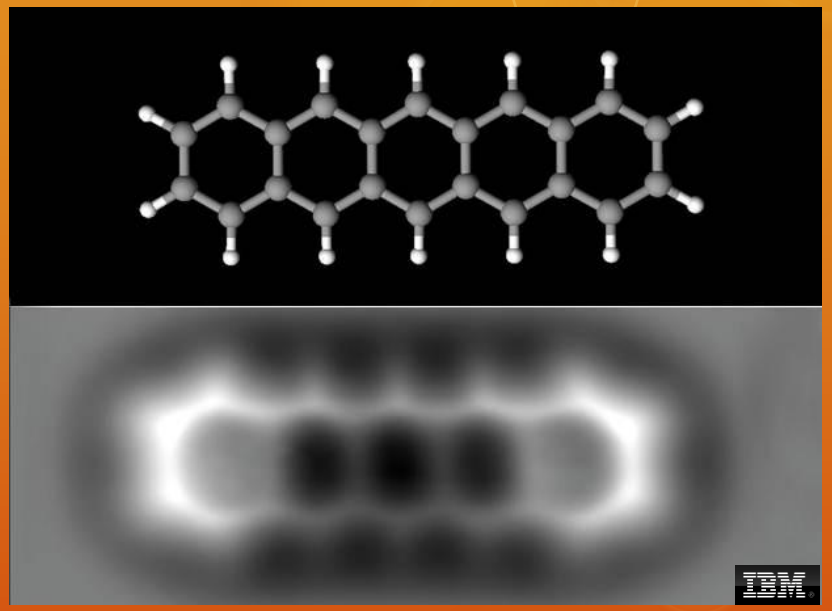
Esto se ha publicado en la revista *Science*,

En otro experimento, publicado en la misma revista, el equipo midió los estados de carga de los átomos con el mismo tipo de microscopio. Así se podrá investigar cómo se trasmite la carga a través de las moléculas o de redes moleculares.

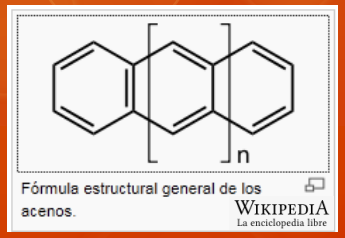
Además, los investigadores han conseguido descubrir que la fuerza repulsiva que les ha permitido obtener el contraste suficiente para la imagen procede del efecto cuántico denominado principio de exclusión de Pauli.

En los últimos años, se había conseguido definir nano estructuras a escala atómica y ahora ha sido posible mostrar la estructura química de una molécula con una resolución atómica, viendo los átomos individuales.

Según Gerhard Meyer se puede considerar este hecho similar a la capacidad de traspasar un tejido blando con rayos X para obtener una imagen nítida de los huesos.



Estructura interna de una molécula de pentaceno, de 1,4 nanómetros de longitud. Abajo, modelo de la misma (los átomos grises son de carbono y los blancos de hidrógeno).- IBM

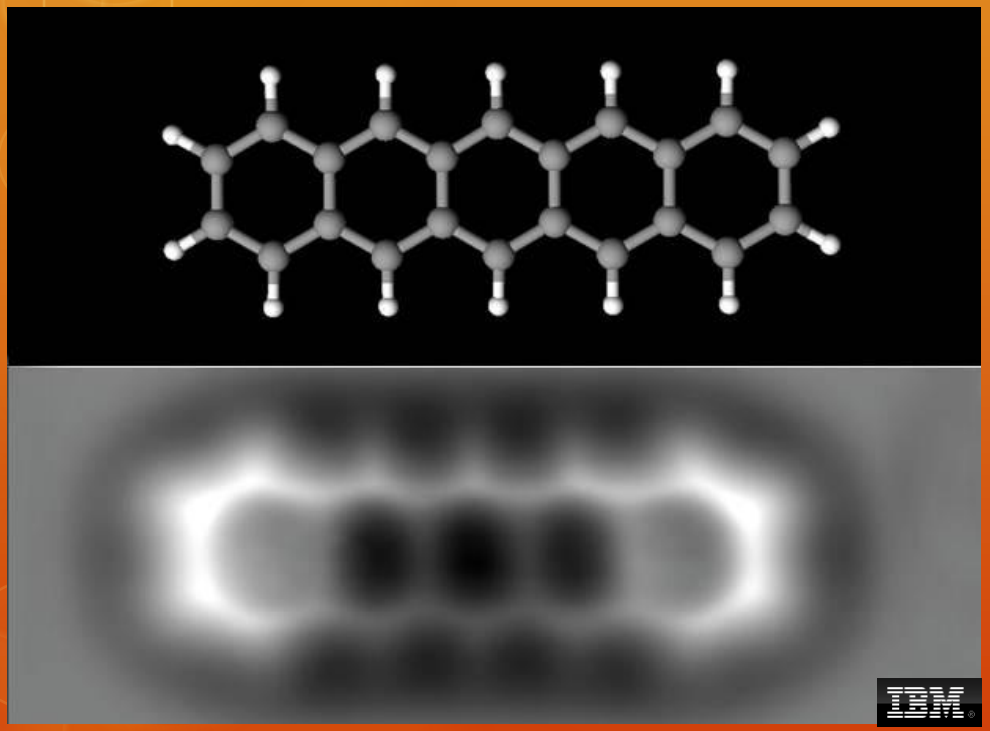


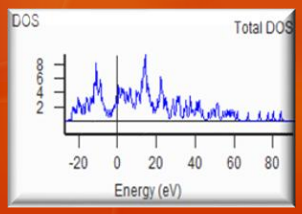
Fórmula estructural general de los acenos.

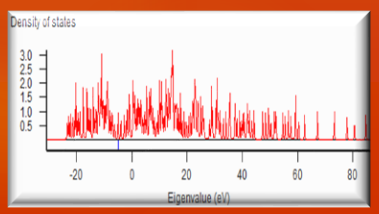
WIKIPEDIA
La enciclopedia libre

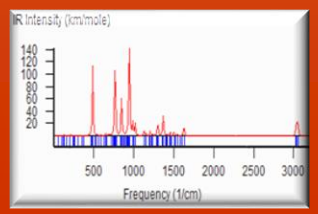
ADF Mapas de potencial eléctrico en $C_{22}H_{14}$

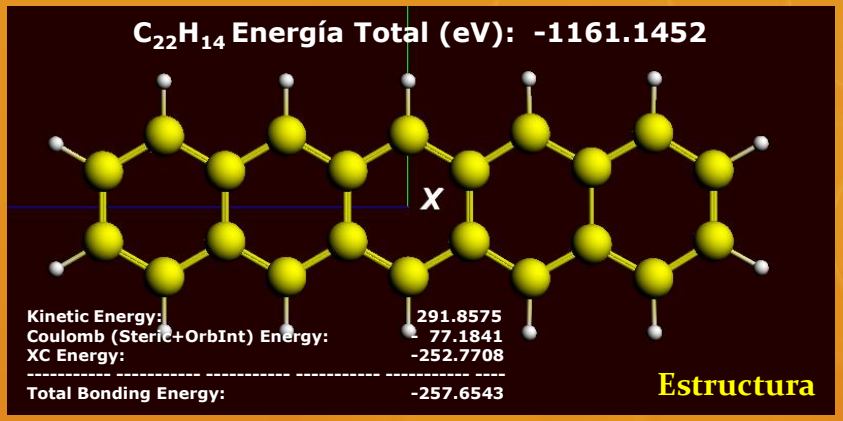
Estructura interna de una molécula de pentaceno, de 1.4 nanómetros de longitud. (los átomos grises son de carbono y los blancos de hidrógeno).- IBM

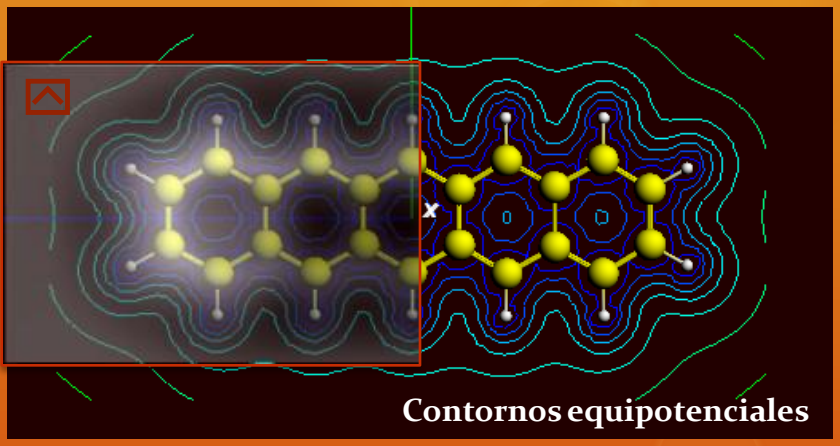


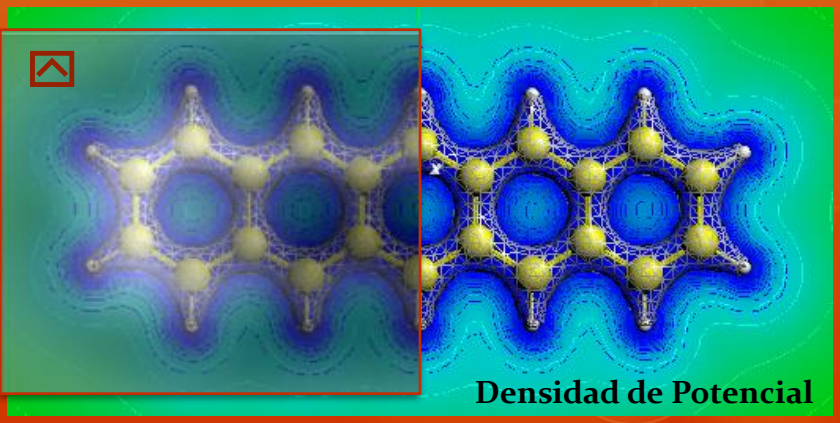








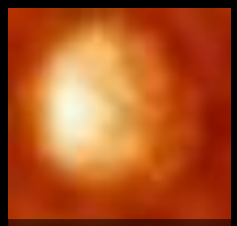




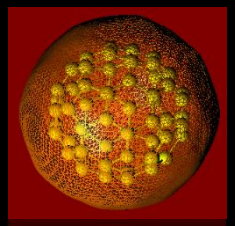
Fulereno C_{60}

Buckminsterfullerene

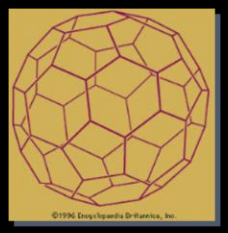
$E_0 = E_c + E_p = -9{,}304.80$ eV



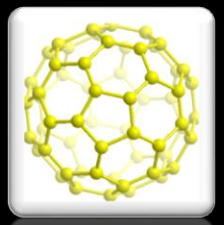
Microscopio de Efecto Túnel, STM

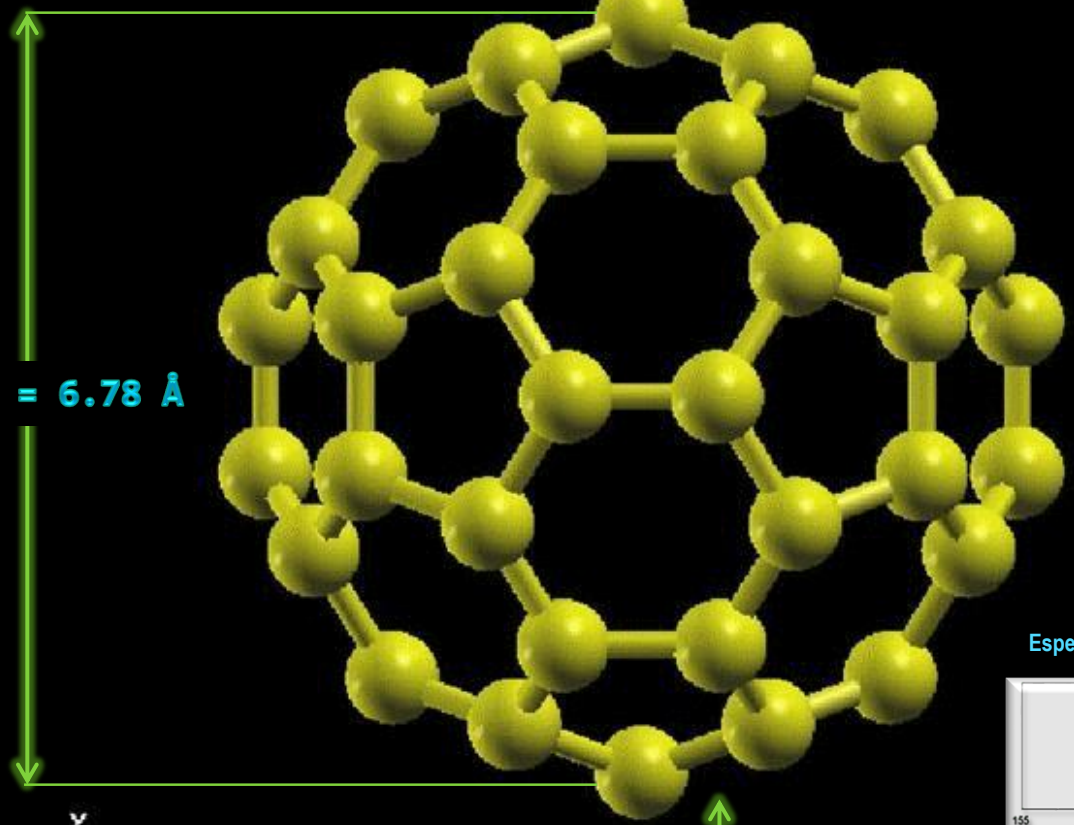


Superficie de Potencial Eléctrico

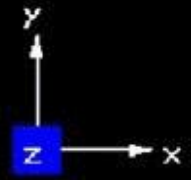


Icosaedro Truncado



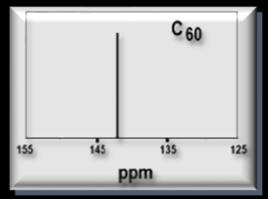


$D(C_{60}) = 6.78$ Å



$\langle d(C\text{-}C) \rangle = 1.436$ Å

Espectroscopia RMN

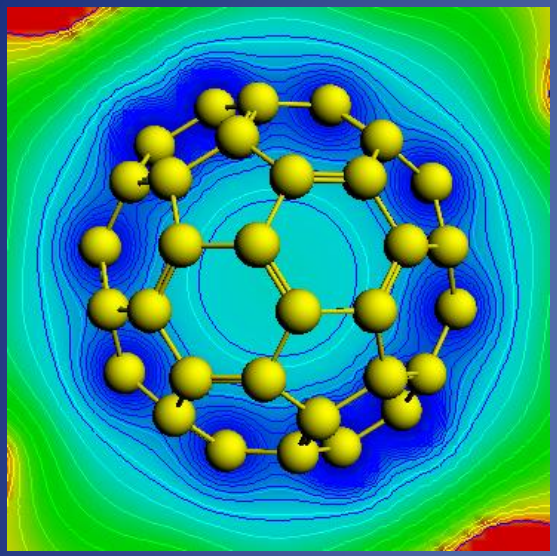


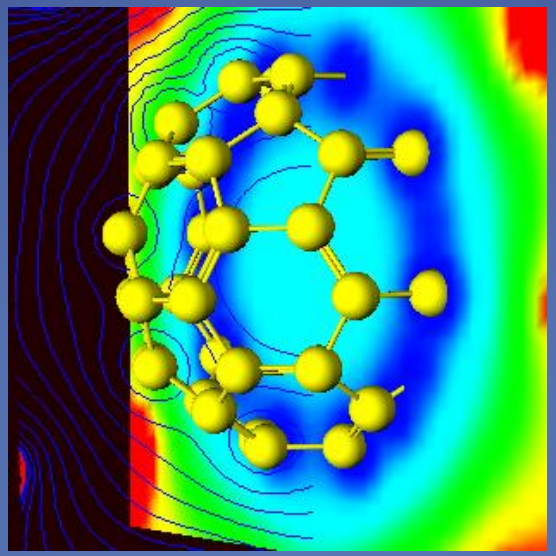
Carbono, C6 (12 uma)
Configuración Electrónica : $[He]2s^2 2p^2$

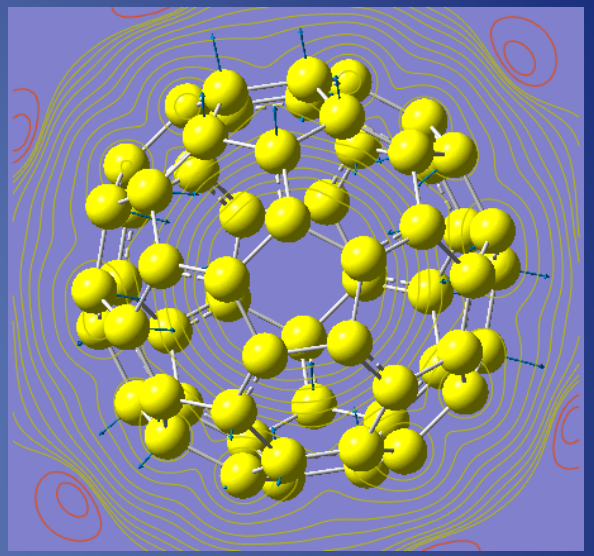
C	1	0	3,449997	0,6848
C	2	3,002716	1,408493	-1,170975
C	3	0	-3,449997	0,6848
C	4	2,279007	-2,579483	-0,723694
C	5	-2,579483	-0,723694	2,279007
C	6	-1,170975	-3,002716	1,408493
C	7	-1,170975	3,002716	1,408493
C	8	-2,579483	0,723694	2,279007
C	9	2,279007	2,579483	-0,723694
C	10	3,002716	-1,408493	-1,170975
C	11	-3,002716	-1,408493	-1,170975
C	12	-3,002716	1,408493	-1,170975
C	13	-0,723694	2,279007	-2,579483
C	14	0,6848	0	-3,449997
C	15	-0,723694	-2,279007	-2,579483
C	16	-2,279007	2,579483	-0,723694
C	17	0,723694	2,279007	-2,579483
C	18	1,408493	-1,170975	-3,002716
C	19	-1,170975	-3,002716	-1,408493
C	20	-3,449997	-0,6848	0
C	21	2,579483	0,723694	2,279007
C	22	2,579483	-0,723694	2,279007
C	23	1,408493	-1,170975	3,002716
C	24	0,6848	0	3,449997
C	25	1,408493	1,170975	3,002716
C	26	1,170975	3,002716	1,408493
C	27	3,449997	0,6848	0
C	28	2,279007	-2,579483	0,723694
C	29	-0,723694	-2,279007	2,579483
C	30	-1,408493	1,170975	3,002716
C	31	1,170975	-3,002716	1,408493
C	32	-1,408493	-1,170975	3,002716
C	33	-0,723694	2,279007	2,579483
C	34	2,279007	2,579483	0,723694
C	35	3,449997	-0,6848	0
C	36	-2,279007	-2,579483	-0,723694
C	37	-3,449997	0,6848	0
C	38	-1,170975	3,002716	-1,408493
C	39	1,408493	1,170975	-3,002716
C	40	0,723694	-2,279007	-2,579483
C	41	-0,6848	0	-3,449997
C	42	-1,408493	-1,170975	-3,002716
C	43	-2,579483	-0,723694	-2,279007
C	44	-2,579483	0,723694	-2,279007
C	45	-1,408493	1,170975	-3,002716
C	46	1,170975	3,002716	-1,408493
C	47	2,579483	-0,723694	-2,279007
C	48	0	-3,449997	-0,6848
C	49	-3,002716	-1,408493	1,170975
C	50	-2,279007	2,579483	0,723694
C	51	-0,6848	0	3,449997
C	52	0,723694	2,279007	2,579483
C	53	3,002716	1,408493	1,170975
C	54	3,002716	-1,408493	1,170975
C	55	0,723694	-2,279007	2,579483
C	56	-2,279007	-2,579483	0,723694
C	57	-3,002716	1,408493	1,170975
C	58	0	3,449997	-0,6848
C	59	2,579483	0,723694	-2,279007
C	60	1,170975	-3,002716	-1,408493

KanBalam
COMPUTO ACADEMICO UNAM
QUANTUM ESPRESSO
AMD Athlon X2
XCrySDen ...
X-window CRYstalline Structures and DENsities
intel inside CORE i3
Nanotube Modeler
Generation of Nano-Geometries
SGH

Potencial Eléctrico y Vibraciones del C_{60}





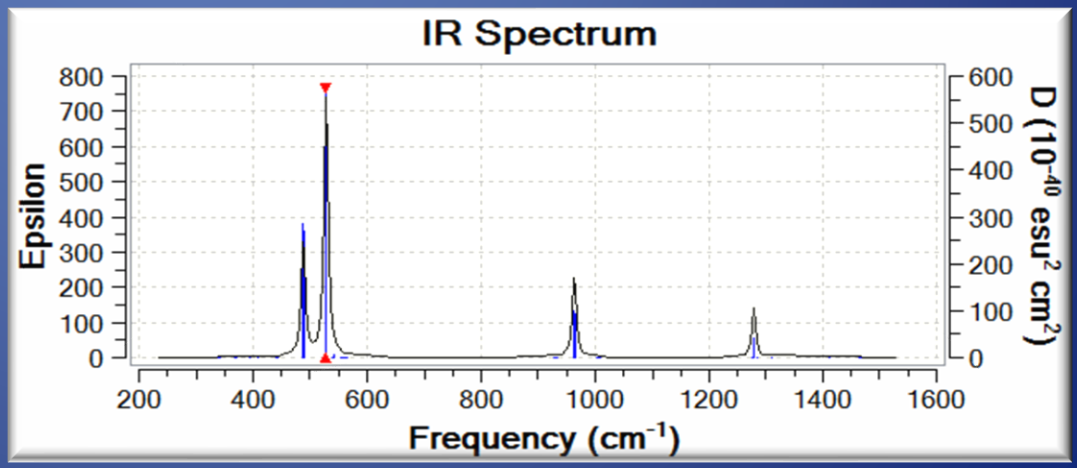


Energía de Enlace LDA	-	554.1522 eV
Energía Total SP		-2,780.5846 eV
Total XC:		-7,715.2889 eV

XC = Intercambio y Correlación LDA

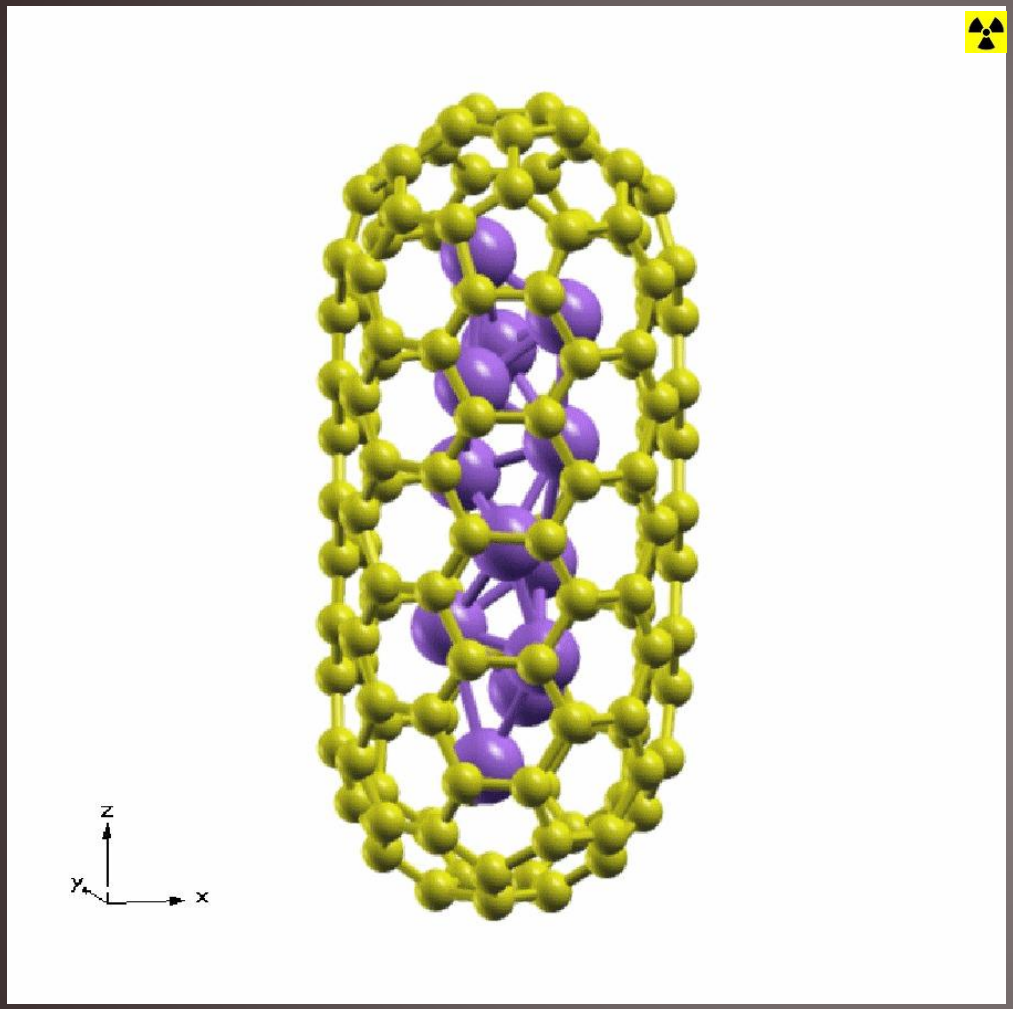
Principales Frecuencias de Oscilación IR

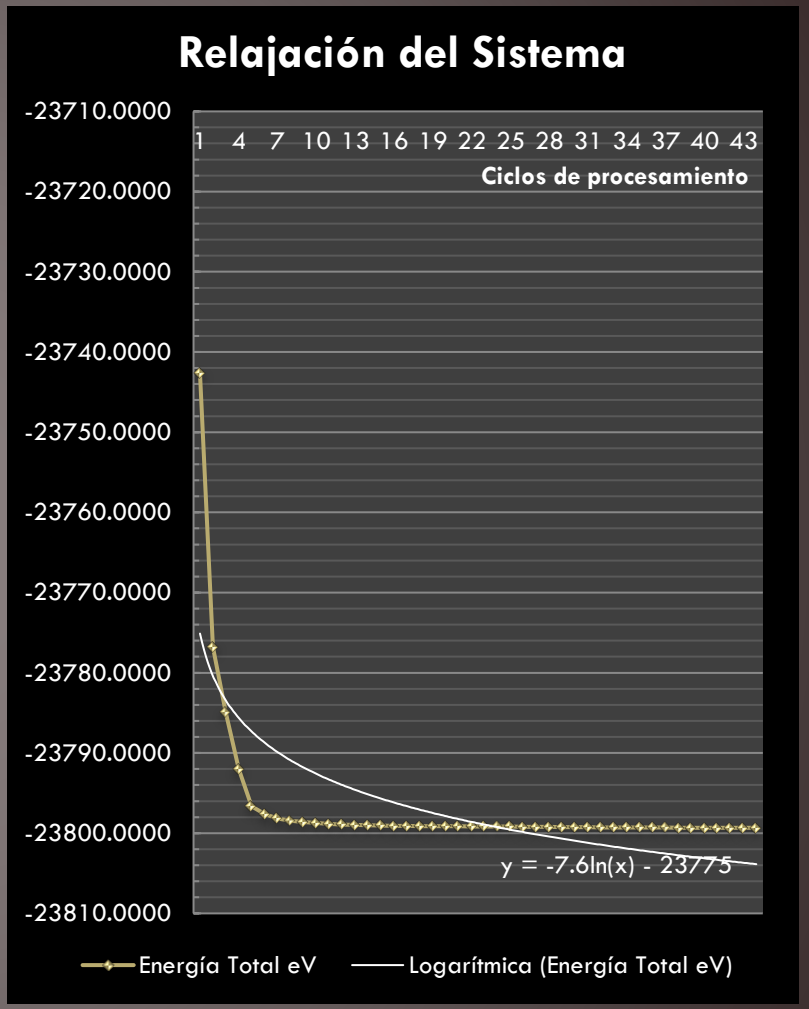
Frecuencia Principal (cm^{-1}) = 528.98 <Exp*>
4 Bandas Activas en el Espectro IR
174 modos de vibración



Kambalam
COMPUTO academico
QUANTUM ESPRESSO
AMD Athlon X2
XCrySDen ...
X-window CRYstalline Structures and DENsities
intel inside CORE i3

Relajación NC_{130} con 6 $^{131}I_2$



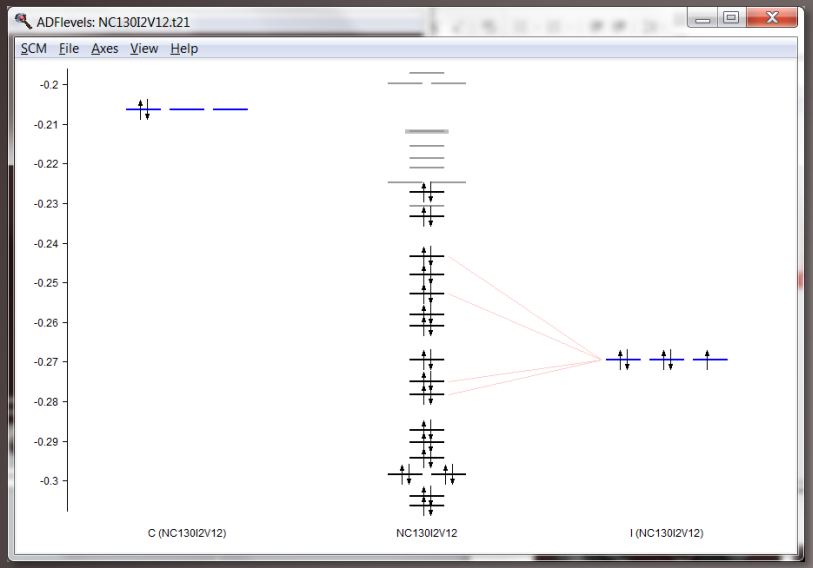


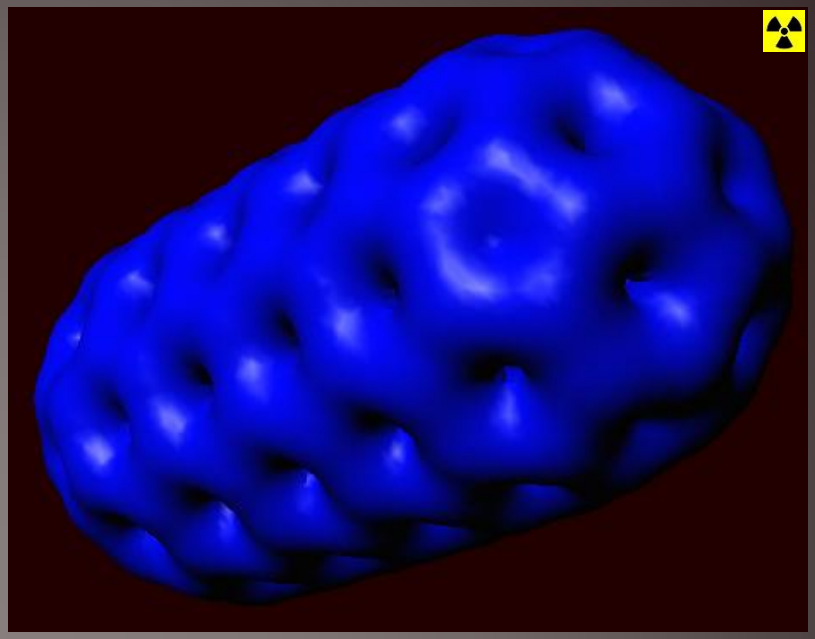
Energía Total del Estado Base = -23,799.3247 eV

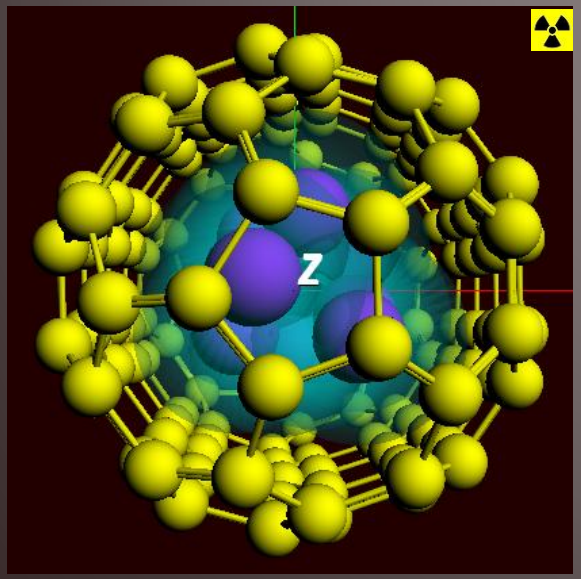
atomic species	valence	mass	pseudopotential
C	4.00	12.0000	C (1.00)
I	7.00	132.0900	I (1.00)

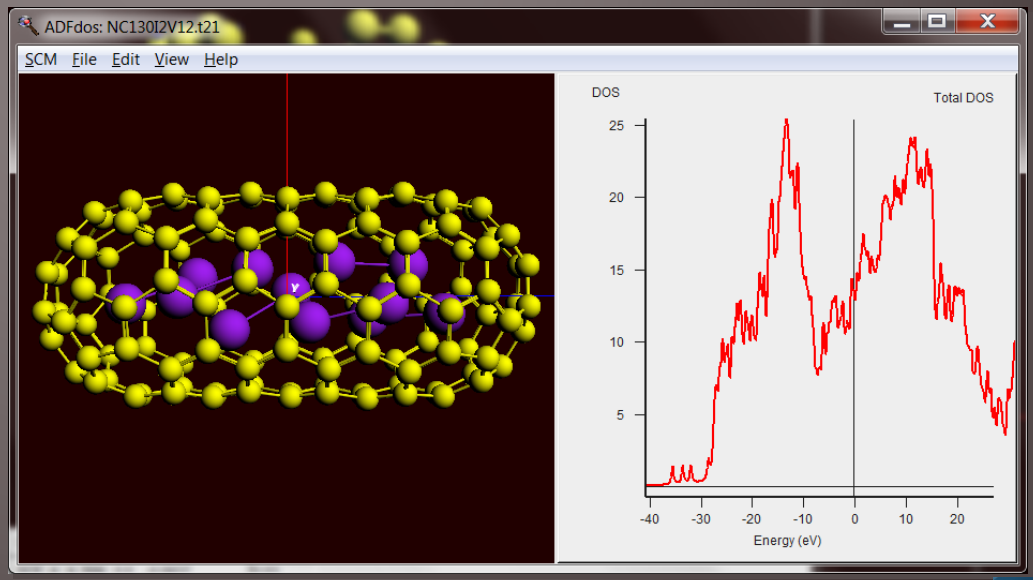
32 MPs, AMD 2 GHz
T = .d .h .m
COMPUTO academico
QUANTUM ESPRESSO
AMD Athlon X2
XCrySDen ...
X-window CRYstalline Structures and DENsities

Interacción con $6^{131}I_2$





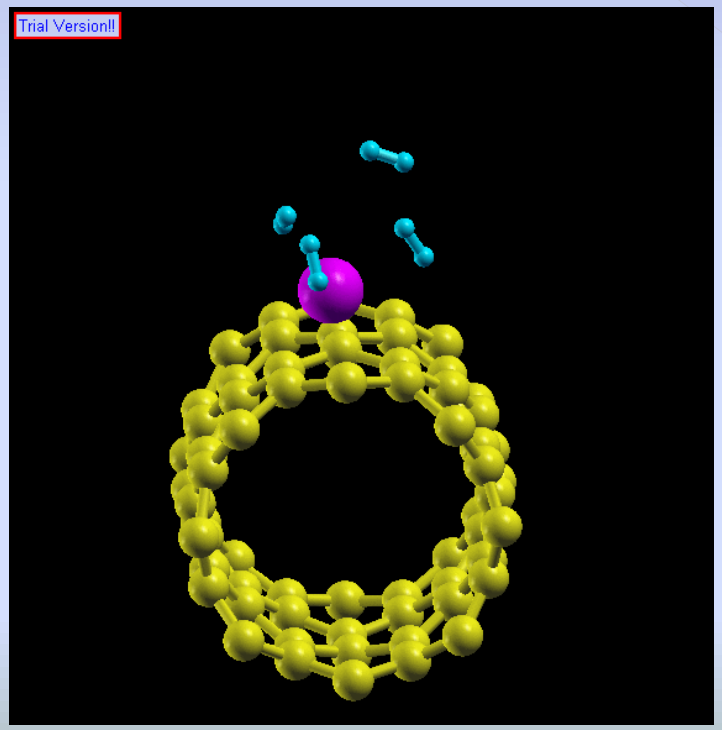




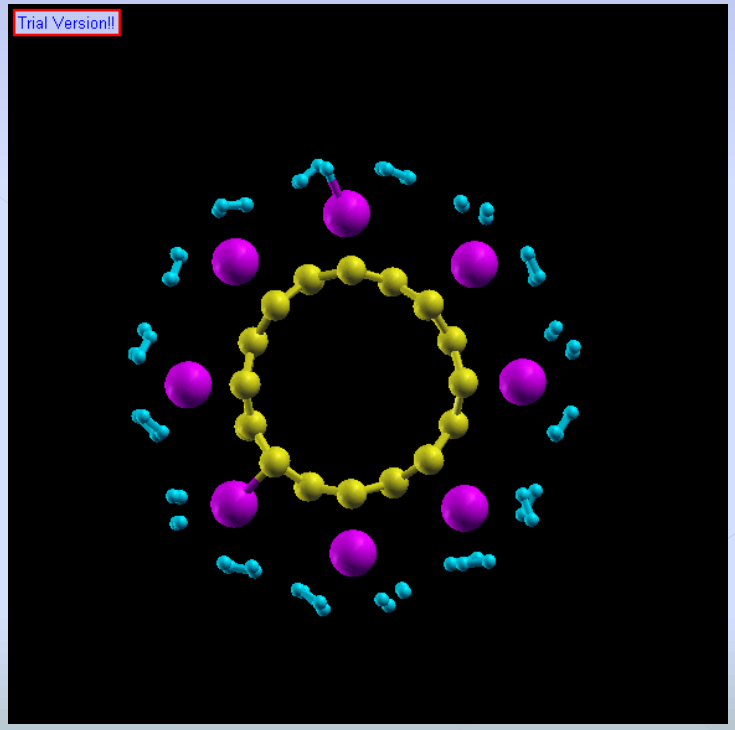
Dinámica molecular DFT

ADSORCIÓN SUPERFICIAL

$C_{64}Li$ 0.77 % en peso de H.
E_{ad}=190 meV/H_2. 300 K



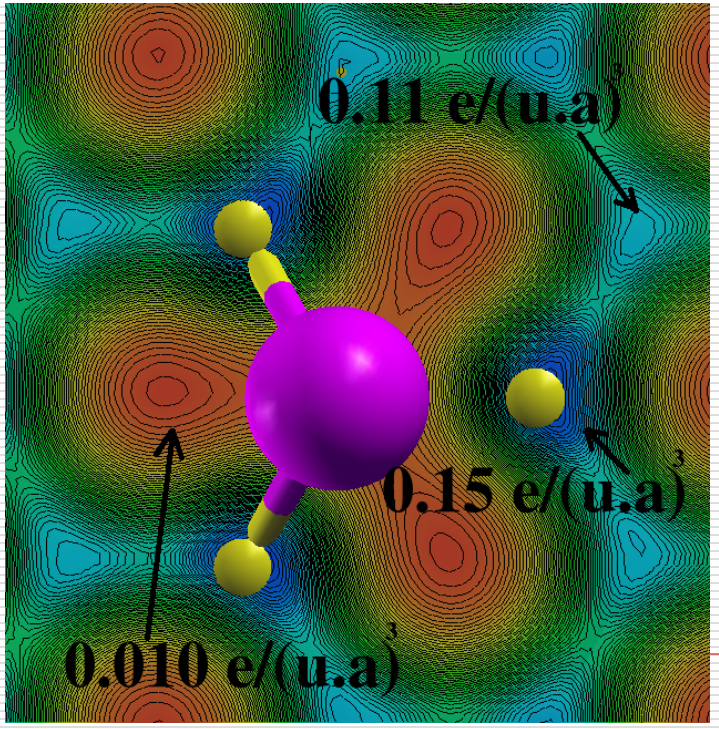
C_4Li 7.5 % en peso de H.
E_{ad}=174 meV/H_2. 300 K

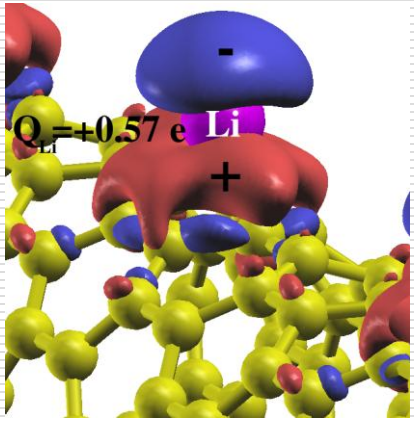


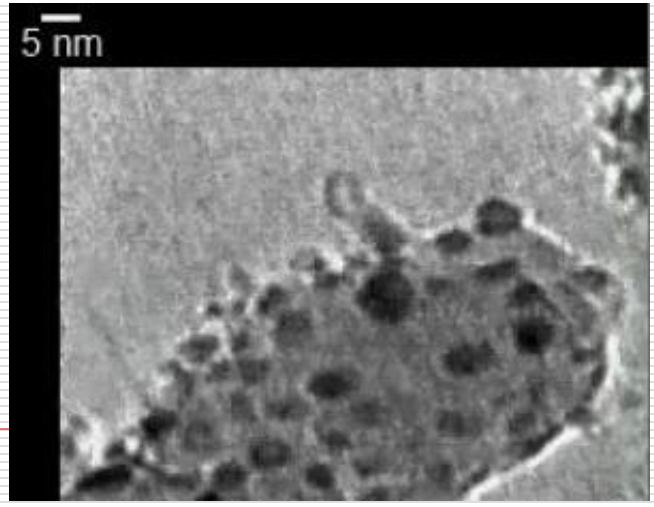
Funcional de Densidad Electrónica

Es posible probar diferentes propiedades de los nanotubos de carbono usando la:

TEORÍA DE LA FUNCIONAL DE DENSIDAD ELECTRÓNICA

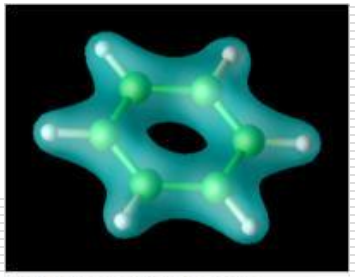






DFT: Ecuaciones de Kohn y Sham

$$\left\{-\frac{\nabla^2}{2}+\sum_I \frac{Z_I}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_I|}+\int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}+v_{xc}(\mathbf{r})\right\}\psi_i(\mathbf{r})=\epsilon_i\psi_i(\mathbf{r})$$



Representación de la densidad electrónica de una molécula de Benceno en el estado fundamental Wikipedia

Pseudopotenciales

$$n(\mathbf{r})=\sum_{\text{ocupados}}|\psi(\mathbf{r})|^2$$

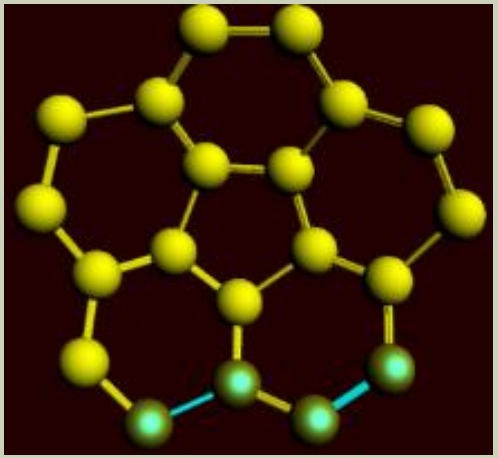
Densidad electrónica

Intercambio y Correlación

$$E[n(\mathbf{r})]=T_s[n(\mathbf{r})]+\int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}+\frac{1}{2}\iint\frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'+E_{xc}[n(\mathbf{r})]$$

ADSORCIÓN DE Ca EN LA SECCIÓN C_{20}

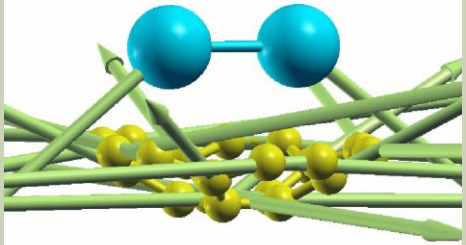
Sección C_{20}



C(14)-C(15) (pm): 155.2
C(17)-C(18) (pm): 143.3

Puerto C_{20} + Ca

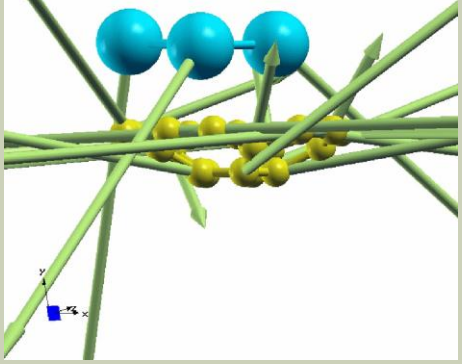
Puerto C_{20} + 2Ca



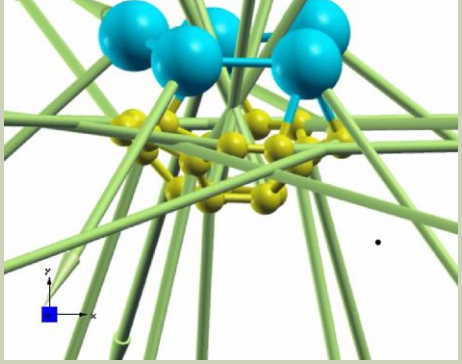
Distancia inicial Ca – Ca = 3.13 Å
Distancia final Ca – Ca = 4.13 Å

Distancia inicial del Ca al carbono más próximo = 2.85 Å

Puerto C_{20} + 3Ca



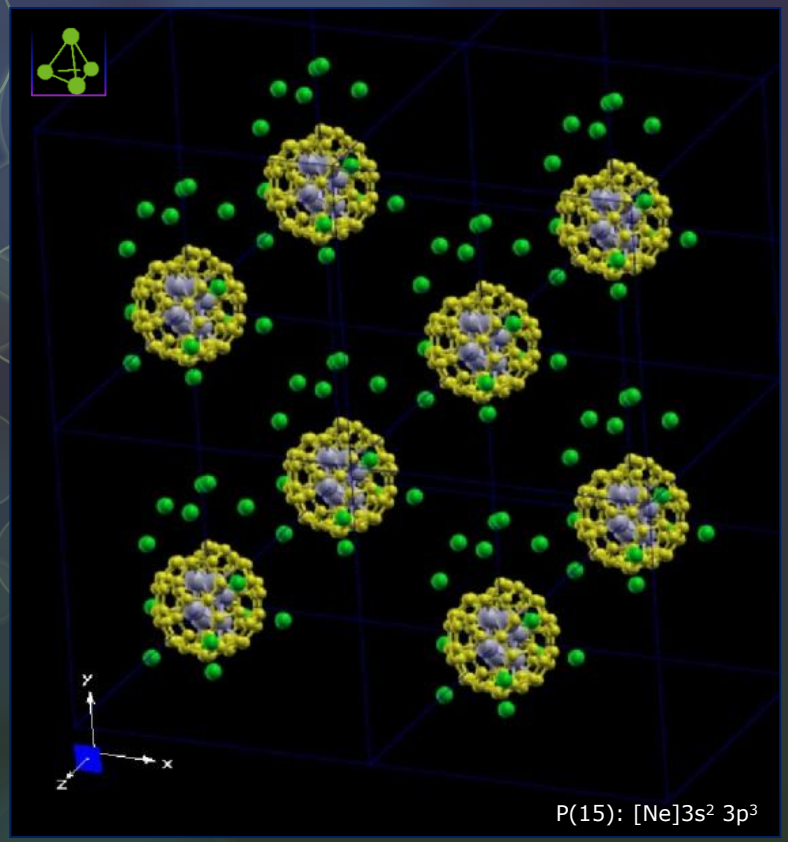
Puerto C_{20} + 5Ca

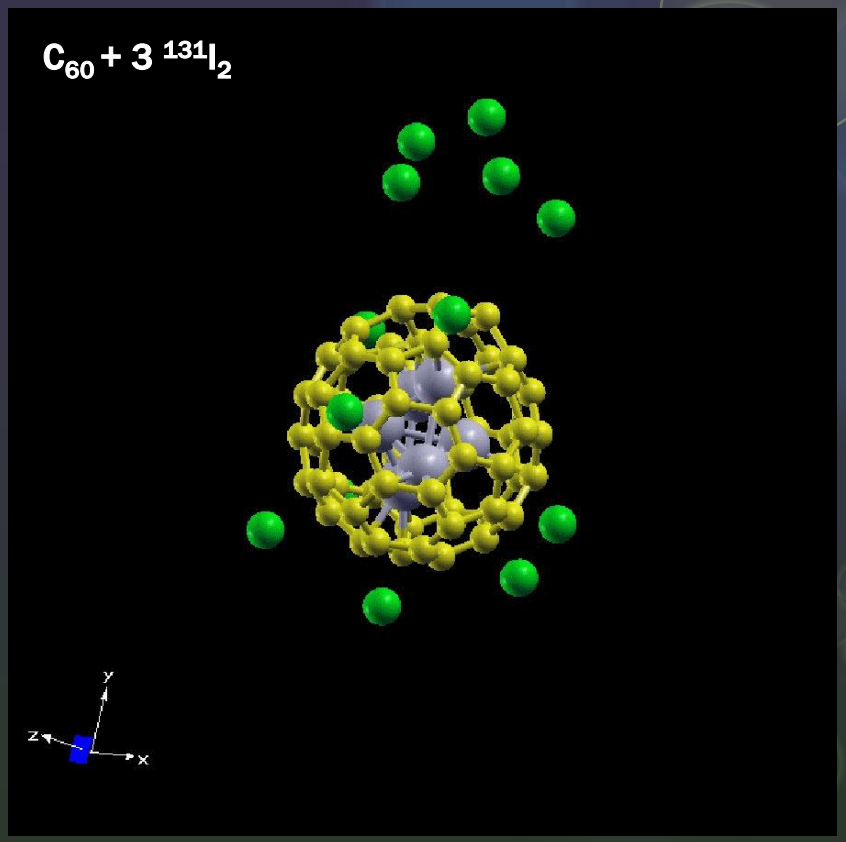


C20+5Ca Energía Total = - 8,166.4623 eV
C20 Energía Total = -3,078.0520 eV
5Ca Energía Total = -5,075.5326 eV
Energía de Adsorción = -12.8777 eV

Kanbalam
COMPUTO academico UNAM
QUANTUM ESPRESSO
AMD Athlon X2 64
XCrySDen ...
X-window CRYstalline Structures and DENsities
SCH

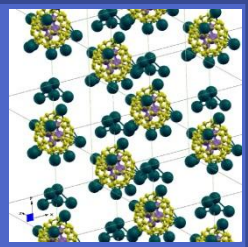
Nanocápsula C_{60}+3$^{131}I_2$ inmersa en Gas de Fósforo^{32}





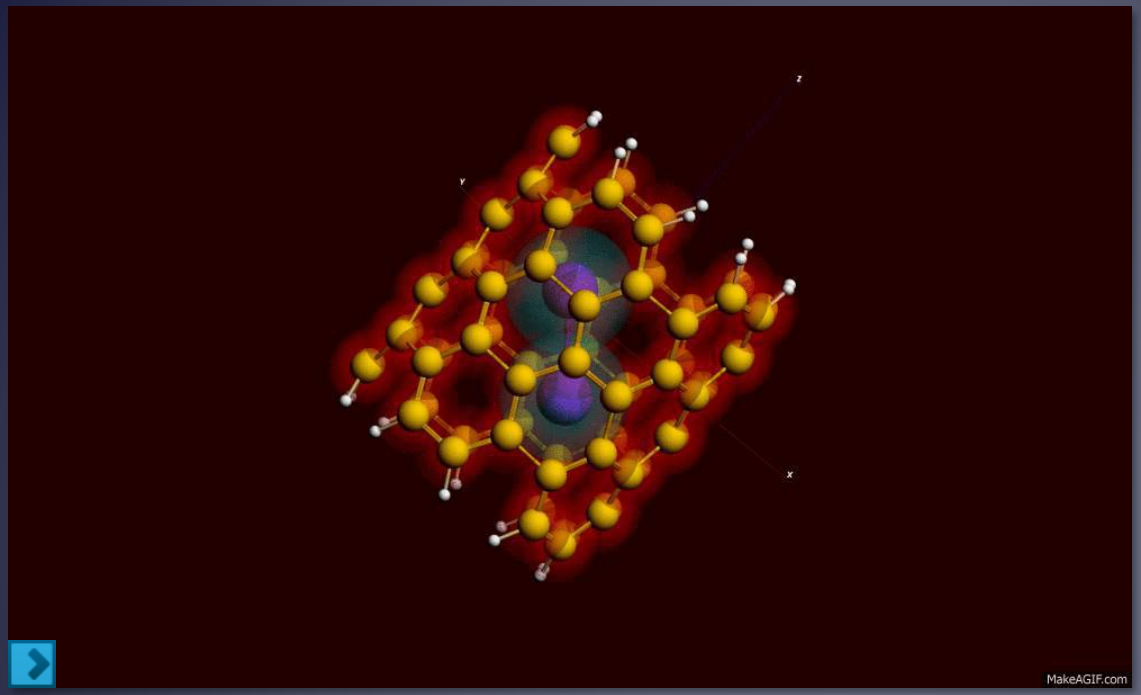
Nanocápsula C_{60} + 3$^{131}I_2$ inmersa en Gas de Estroncio^{89}

CÁLCULO EN PROCESO

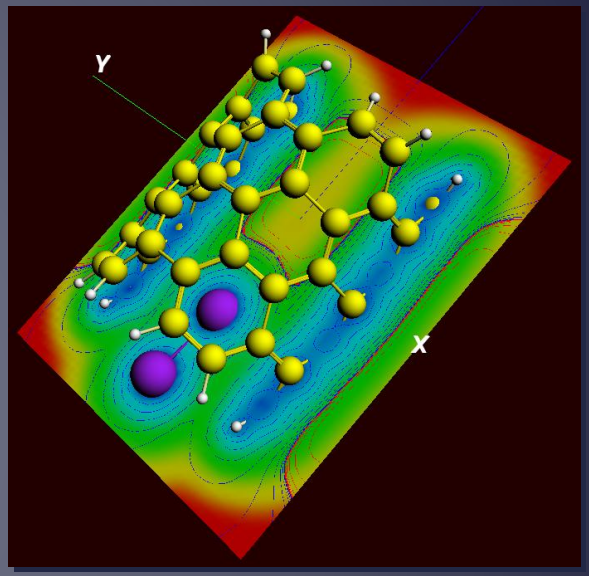


El Fósforo en gas, primero se adhiere a la Nanocápsula de C_{60} para luego romper los enlaces entre los carbonos y con ello la estructura esférica, el contenido de Yodo radioactivo es liberado al medio exterior de la nanocápsula.

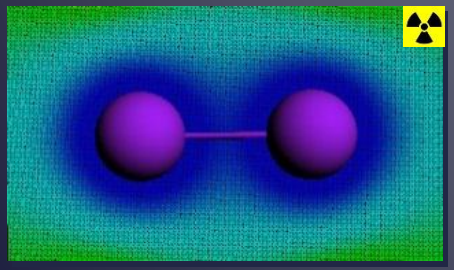
Interacción de un Nanotubo $C_{90}H_{20}$ con $^{131}I_2$



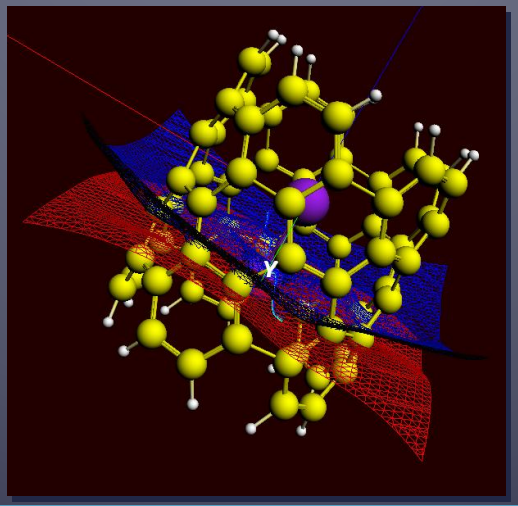
Mapa de Potencial Eléctrico



Optimización Geométrica



Potencial Eléctrico del $^{131}I_2$



El campo eléctrico molecular del nanotubo de carbono repele a la molécula de Yodo

Springer Link

Search

Home • Contact Us

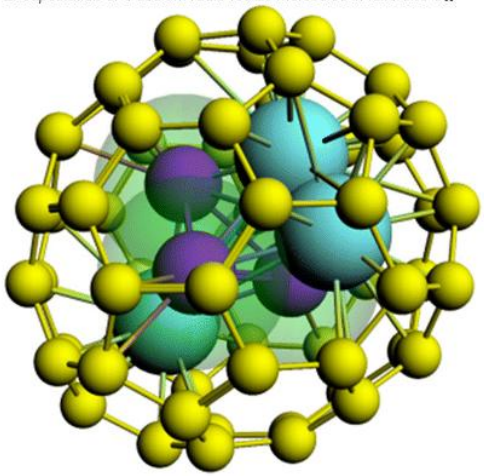
» Look Inside » Get Access

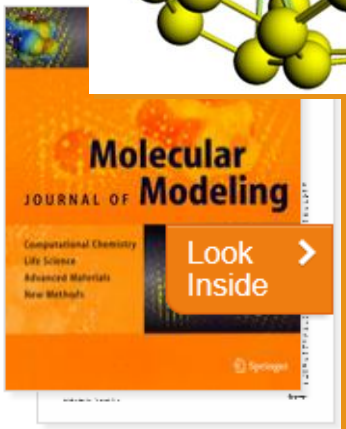
Journal of Molecular Modeling
March 2014, 20:2130

Encapsulation of sodium radio-iodide in fullerene C_{60}

Alejandro Valderrama, José Guzman

Figure
Encapsulation of 3 sodium radio-iodide molecules in fullerene C_{60}





Purchase on Springer.com
$39.95 / €34.95 / £29.95*
Buy now
* Final gross prices may vary according to local VAT.

» Get Access

Abstract

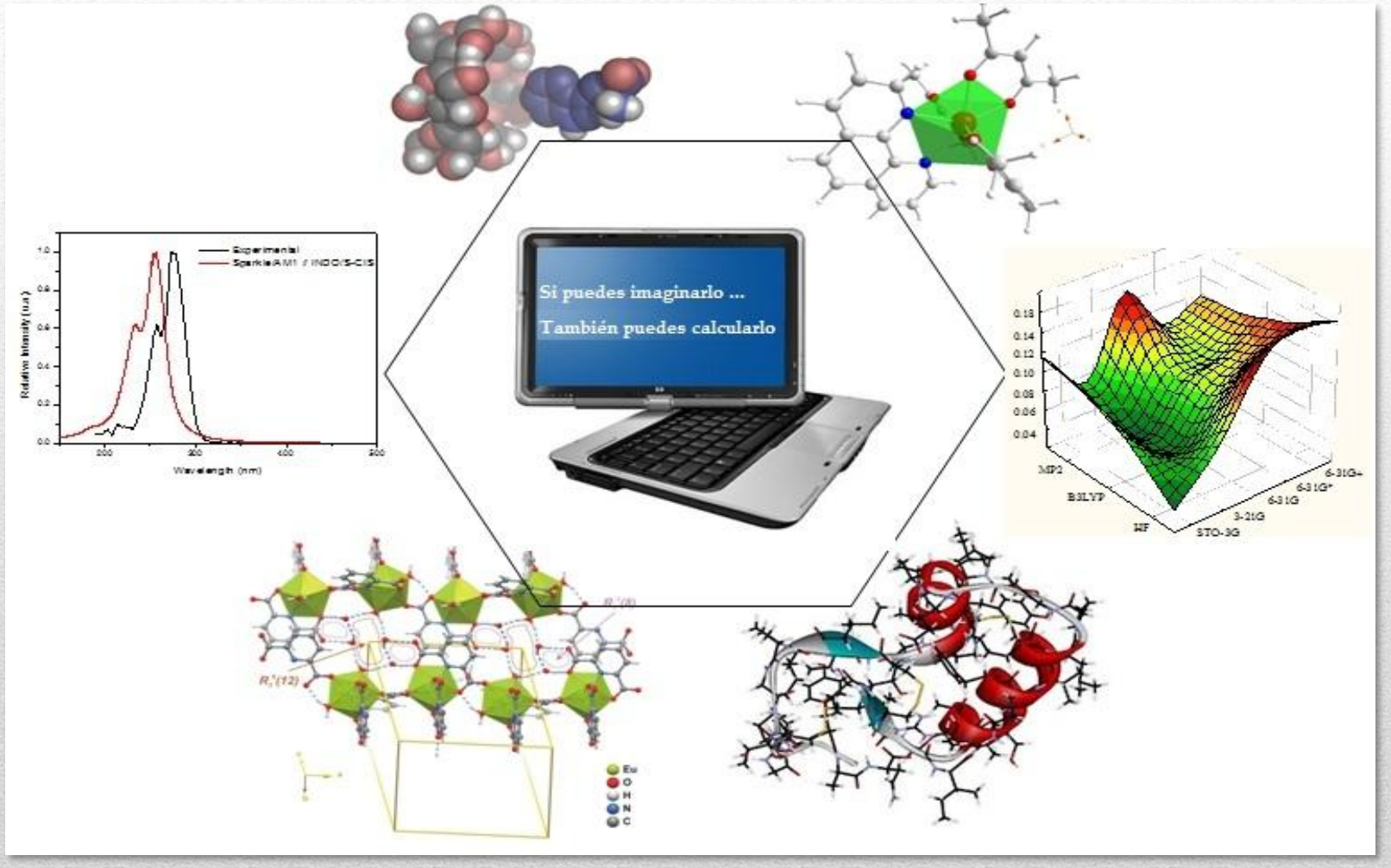
In this work we have studied the well-known "Buckminsterfullerene" C_{60} containing different amounts, from one to four molecules, of sodium radio-iodide ($Na^{131}I$), with density functional theory geometrical optimizations and molecular dynamics at 310 K and atmospheric pressure. We found that nanocapsules with the radioactive content $Na^{131}I@C_{60}$, $2Na^{131}I@C_{60}$ and $3Na^{131}I@C_{60}$ are stable.

Within this Article

- Introduction
- Methods
- Results and discussion
- Conclusions
- References
- References

Other actions

Así que…


Si puedes imaginarlo …
También puedes calcularlo
Experimental
Sparkle/AM1 / INDO/S-CIS
Relative Intensity (u.a.)
Wavelength (nm)
MP2
B3LYP
HF
6-31G+
6-31G*
6-31G
3-21G
STO-3G
Eu
O
H
N
C

2. Manejo de Directorios

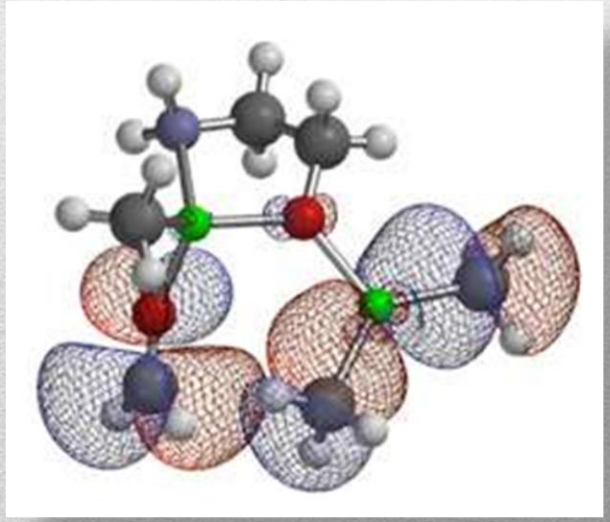
1. **Crea en tu computadora un espejo de:**

2. **Instala las Aplicaciones Disponibles.**

SEGUNDA SESIÓN

CONTENIDO

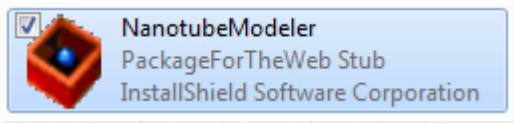
1. Instalación de software.
2. Coordenadas de fullerenos.
3. Manejo de archivos.
4. Hojas de grafeno.



1. Instalación de software

1. Ubicarse en la carpeta :
   C:\Química Computacional\Software\NanotubeModeler

2. Dar doble clic sobre el ícono:



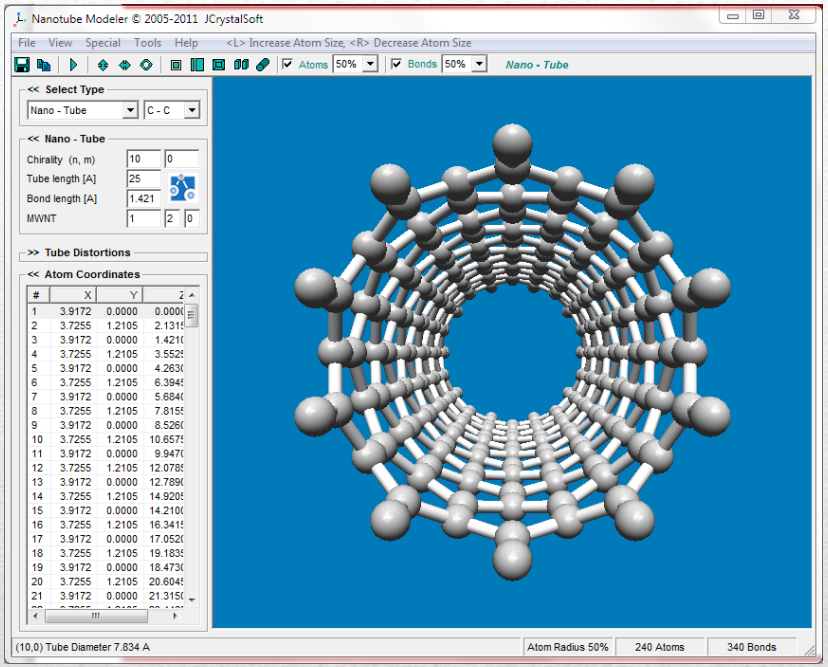
3. Realizar la instalación del paquete en el mismo directorio.

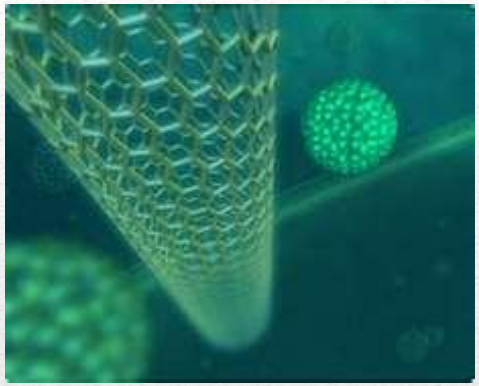
4. Ejecutar NanotubeModeler.

5. Insertar el los discos de GaussianView 5.0 y realizar las instalaciones respetando los nombres de carpeta del paquete.

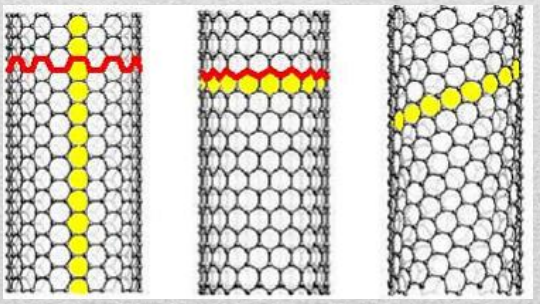
6. Ejecutar GaussianView 5.0

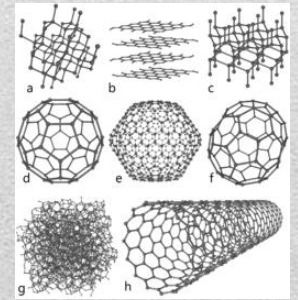
2. Coordenadas de fullerenos

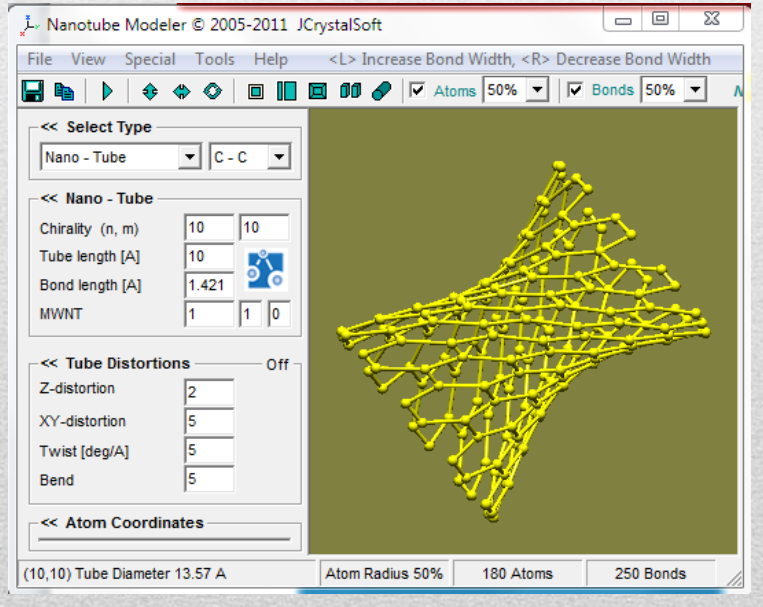




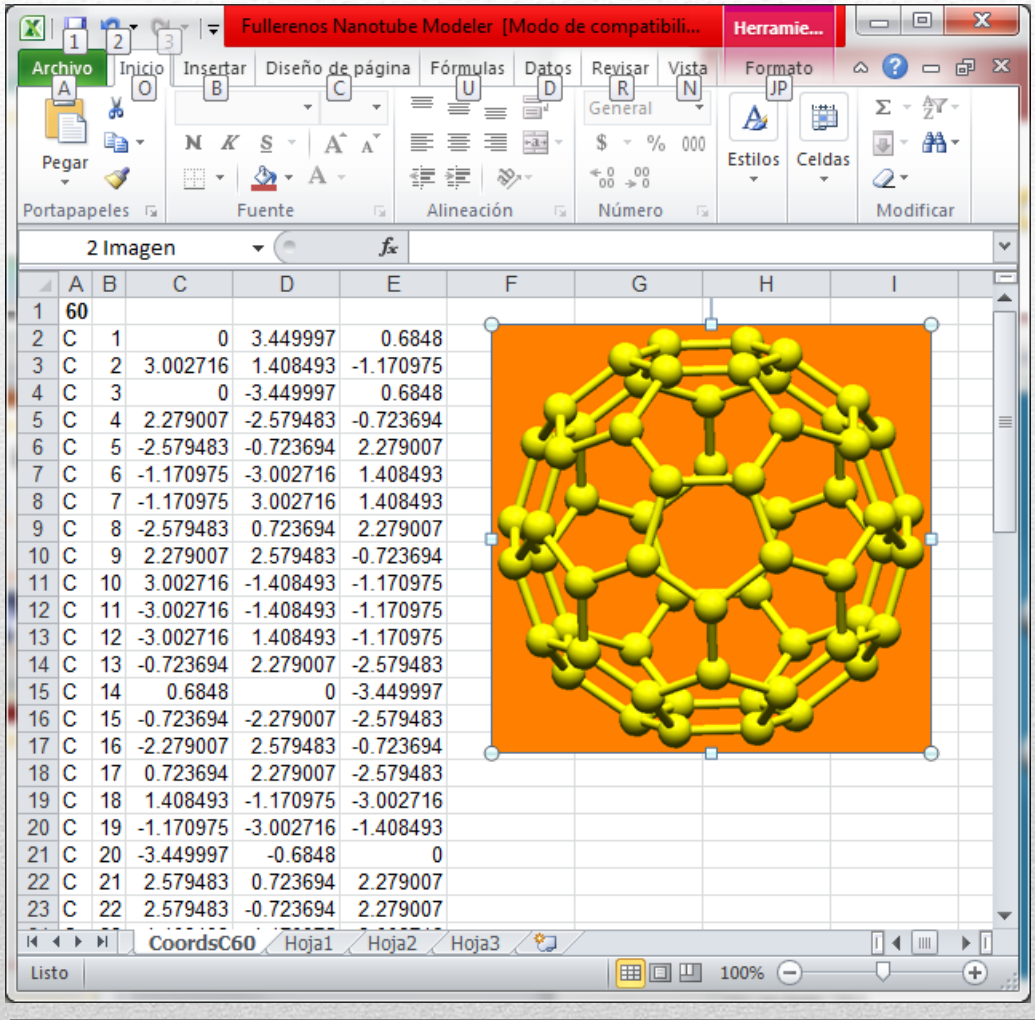
- Transistores
- Fibras sintéticas
- Reconocedores moleculares
- Sensores ópticos
- Sistemas fotovoltaicos
- Termo células
- Fotosíntesis artificial
- Fármacos



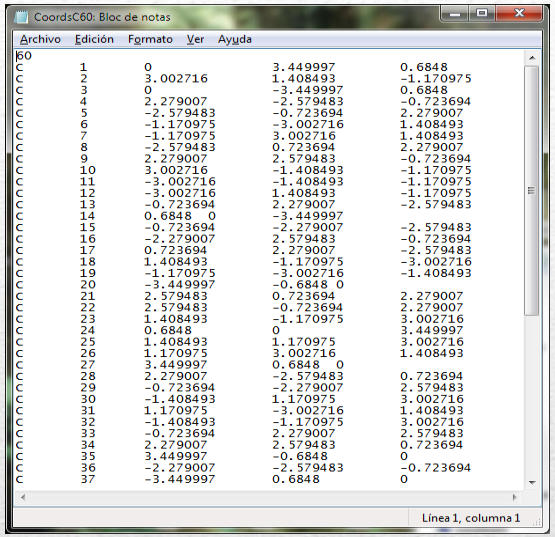


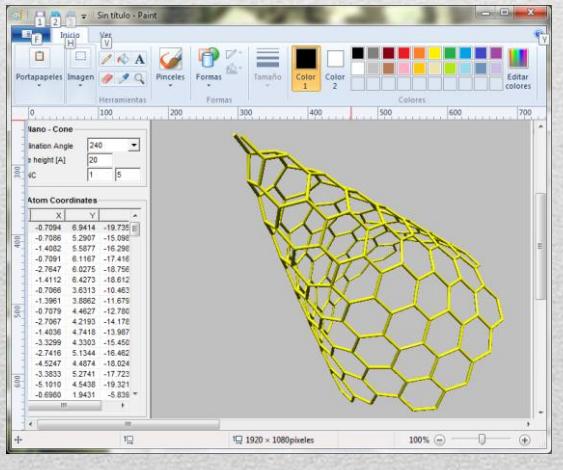


3. Manejo de Archivos

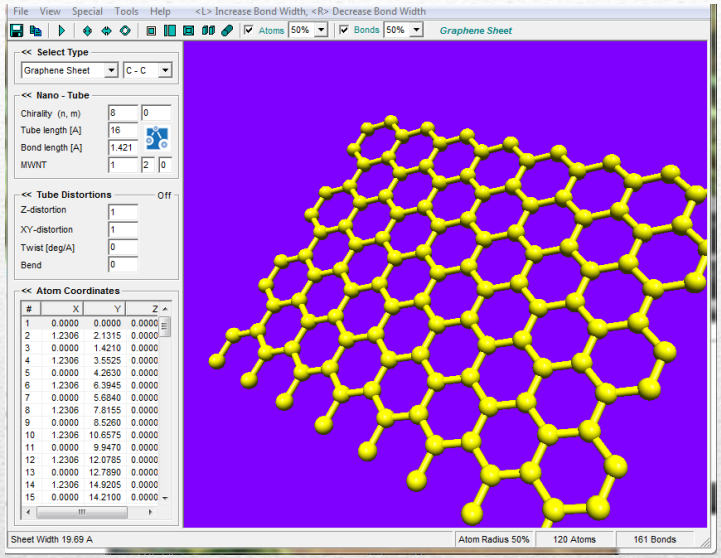


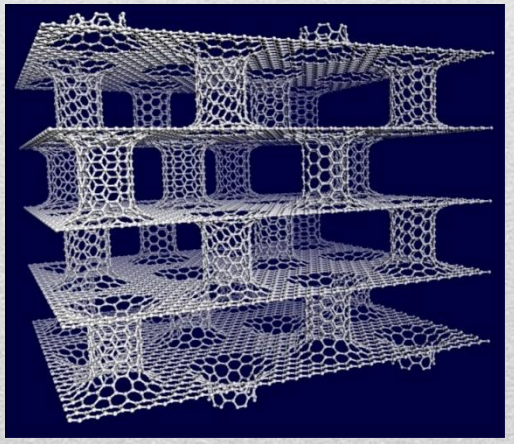
	A	B	C	D	E
1	60				
2	C	1	0	3.449997	0.6848
3	C	2	3.002716	1.408493	-1.170975
4	C	3	0	-3.449997	0.6848
5	C	4	2.279007	-2.579483	-0.723694
6	C	5	-2.579483	-0.723694	2.279007
7	C	6	-1.170975	-3.002716	1.408493
8	C	7	-1.170975	3.002716	1.408493
9	C	8	-2.579483	0.723694	2.279007
10	C	9	2.279007	2.579483	-0.723694
11	C	10	3.002716	-1.408493	-1.170975
12	C	11	-3.002716	-1.408493	-1.170975
13	C	12	-3.002716	1.408493	-1.170975
14	C	13	-0.723694	2.279007	-2.579483
15	C	14	0.6848	0	-3.449997
16	C	15	-0.723694	-2.279007	-2.579483
17	C	16	-2.279007	2.579483	-0.723694
18	C	17	0.723694	2.279007	-2.579483
19	C	18	1.408493	-1.170975	-3.002716
20	C	19	-1.170975	-3.002716	-1.408493
21	C	20	-3.449997	-0.6848	0
22	C	21	2.579483	0.723694	2.279007
23	C	22	2.579483	-0.723694	2.279007

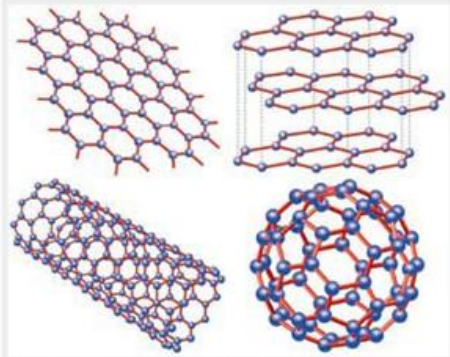




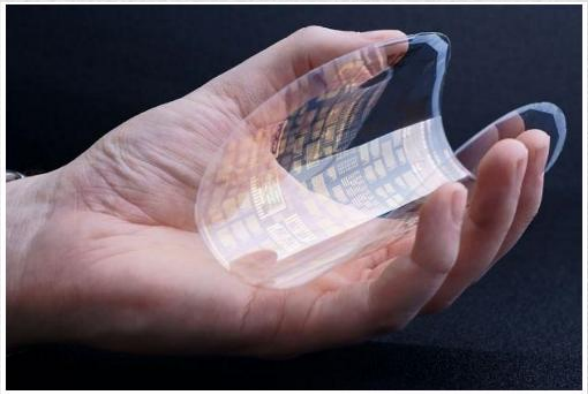
4. Hojas de grafeno







El siliceno presenta mejores propiedades que el grafeno, así como su compatibilidad con los componentes semiconductores de la actualidad y bajo precio

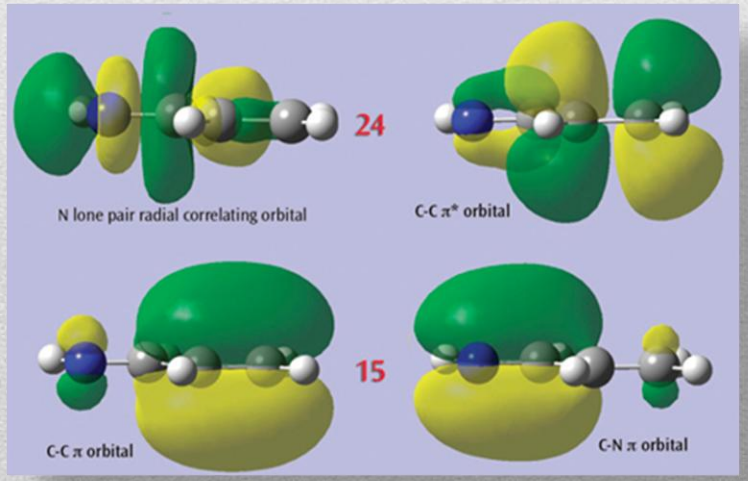


El Grafeno es el material del futuro

TERCERA SESIÓN

CONTENIDO

1. Introducción GaussView 5.0
2. Construcción de una estructura molecular.
3. Distribuciones de Carga.
4. Orbitales HOMO y LUMO: Superficies y Contornos.
5. Modos de Vibración.



1. Introducción a GaussView 5.0

- ✓ **Optimizar estructuras de moléculas.**
- ✓ **Visualizar orbitales moleculares.**
- ✓ **Simular superficies de densidad electrónica y de potencial electrostático.**
- ✓ **Calcular cargas atómicas con diferentes métodos.**
- ✓ **Realizar animaciones de los modos normales correspondientes a las frecuencias de vibración.**
- ✓ **Determinar espectros IR, Raman, NMR y VCD.**
- ✓ **Grabar animaciones de optimizaciones de energía en archivos .gif.**
- ✓ **Graficar la energía total y muchos otros datos computados.**

GaussView 5.0x está disponible para Windows XP/Vista/7, UNIX/LINUX, Mac, etc.

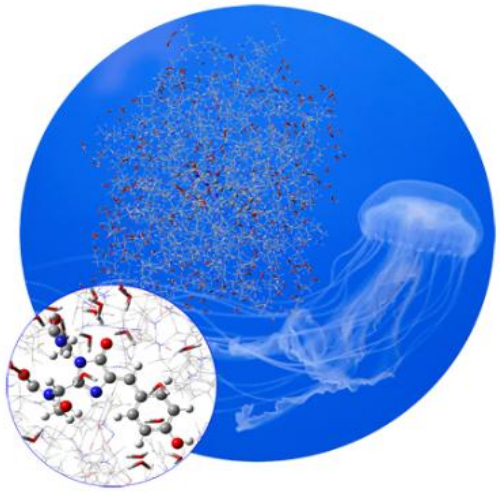
REQUIERE: 300 MB para almacenamiento en el DD y 1 GB de RAM en todas las versiones.

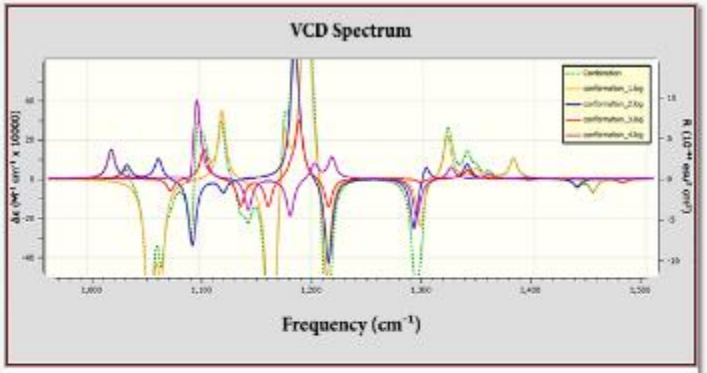
New Chemistry in Gaussian 16

Gaussian 16 expands the range of molecules and types of chemical problems that you can model.

Explore New Substances and Environments

- GaussView can directly open files from the Protein Data Bank (PDB files).





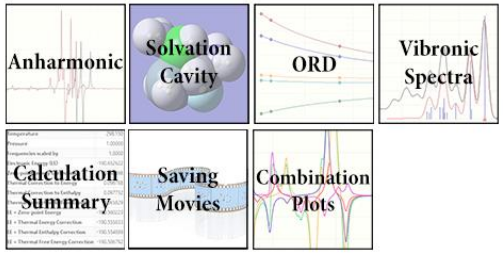
GaussView 6 in Action

Become familiar with GaussView 6's wide array of new features through brief video demos.

More...

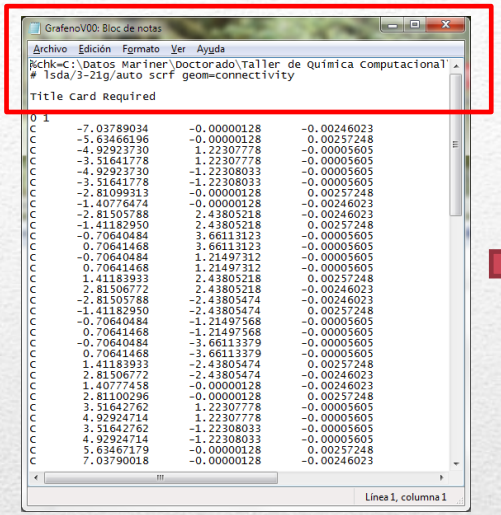
What's New in GaussView 6

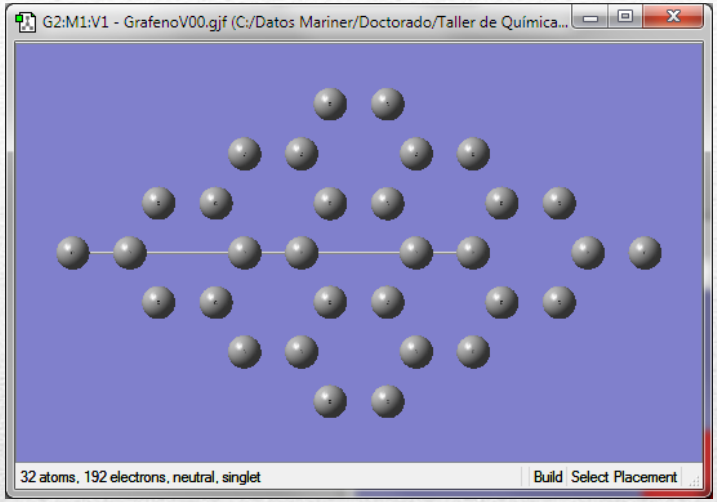
Results Visualization



Job Setup Features

Importación de Coordenadas

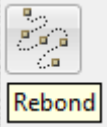


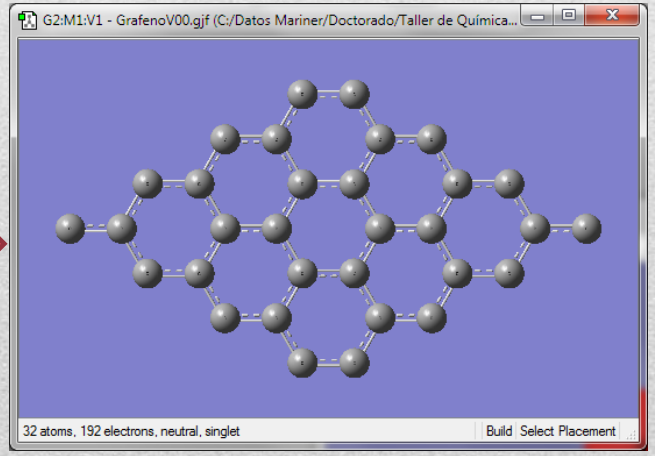


Herramientas: Cortar, Copiar, Pegar y Borrar

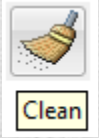
UNDO y REDO

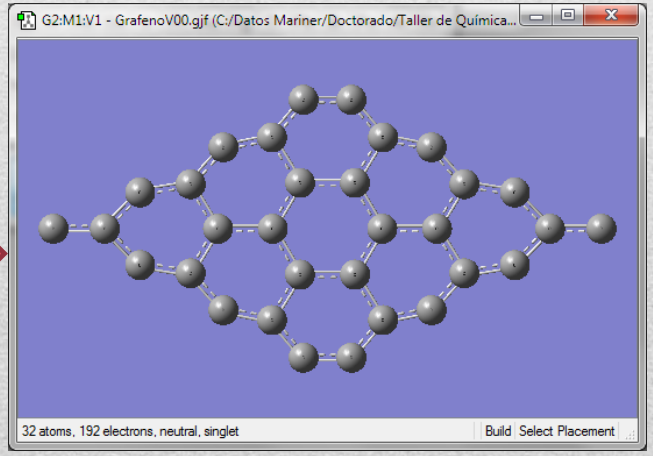
Recalcula los enlaces atómicos con un algoritmo de distancias.



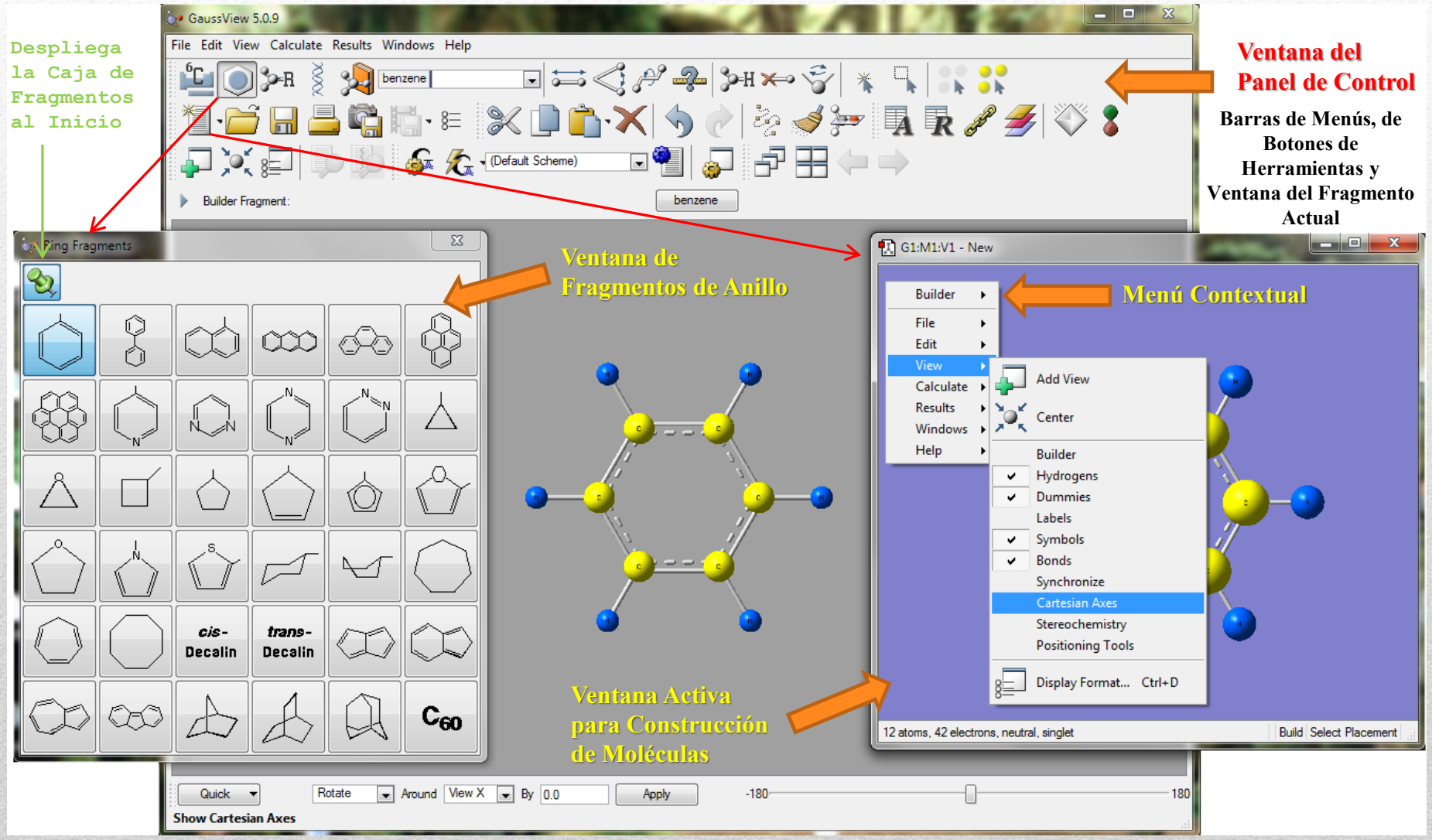


Ajusta la geometría molecular con un algoritmo de "intuición química".

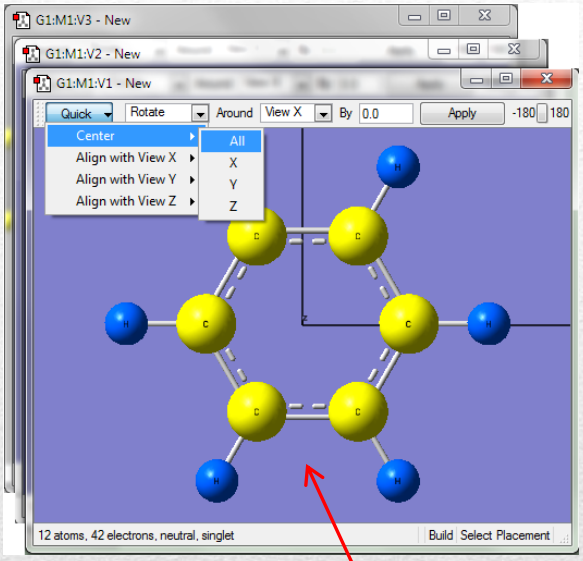




La interface de GaussView 5.0 consta de muchas ventanas, cajas de diálogo y menús contextuales que aparecerán durante el trabajo:



Manejo de una Molécula en la Vista de Construcción

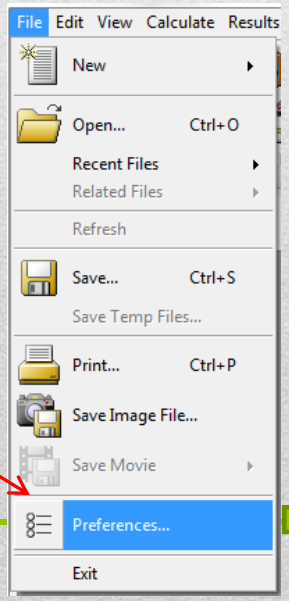


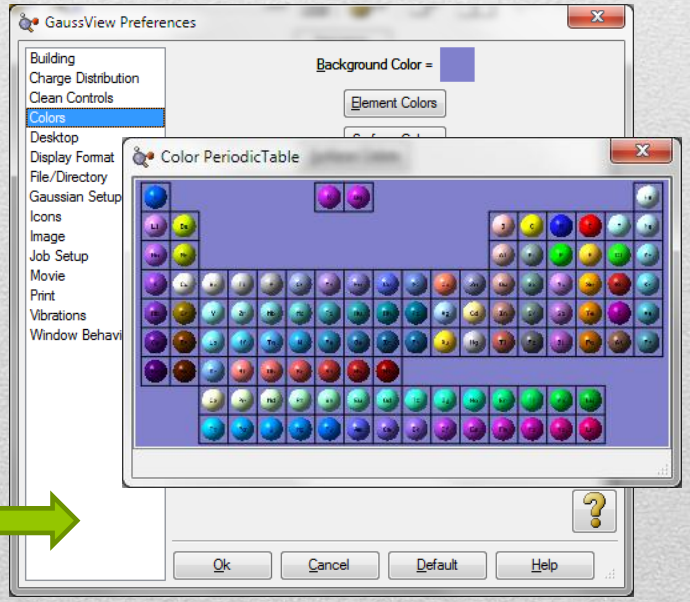
= DESPLAZAMIENTO

= ROTACIÓN

= CAMBIO DE TAMAÑO

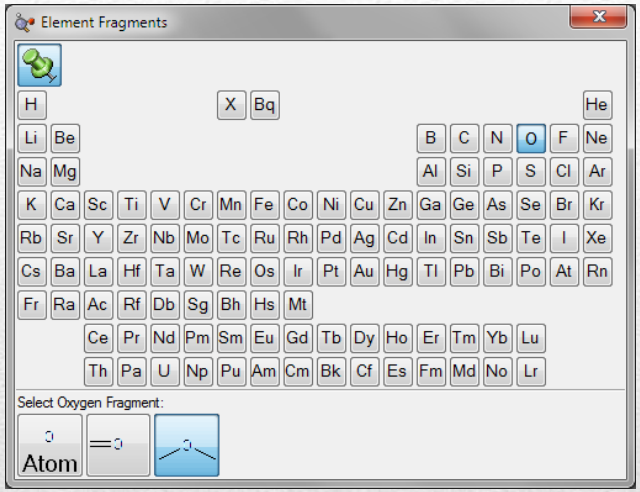
Para cambiar los colores se puede usar la opción:

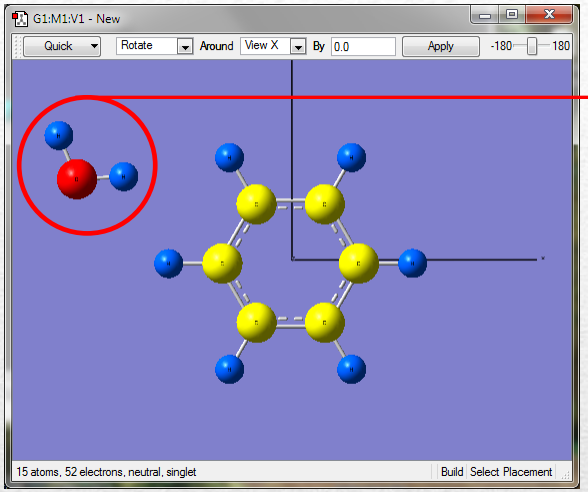




Manipulación de un Fragmento de Elemento con Valencia

FRAGMENTOS



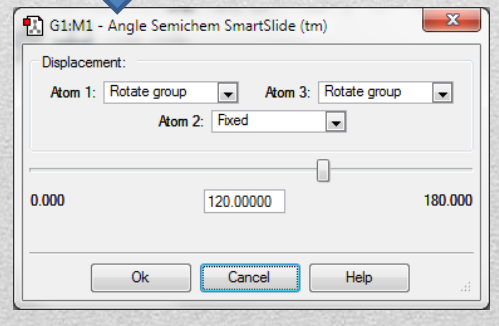


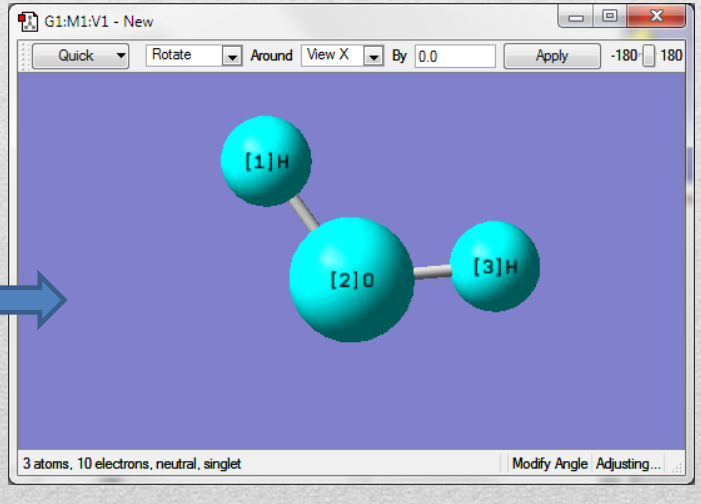
Movimientos del Fragmento

= DESPLAZAMIENTO

= ROTACIÓN

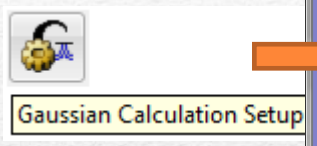
Herramientas de Selección

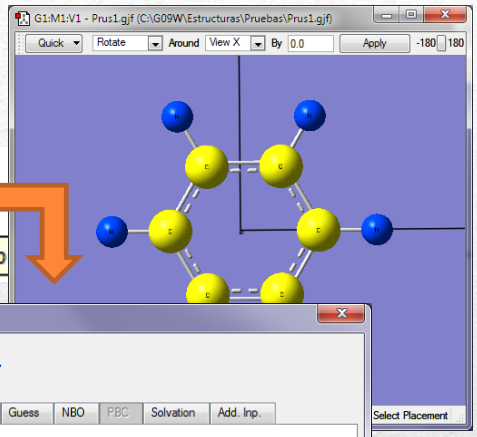


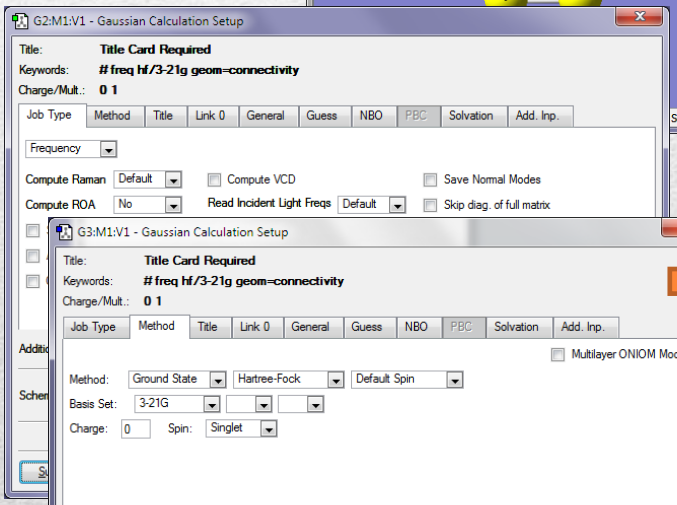


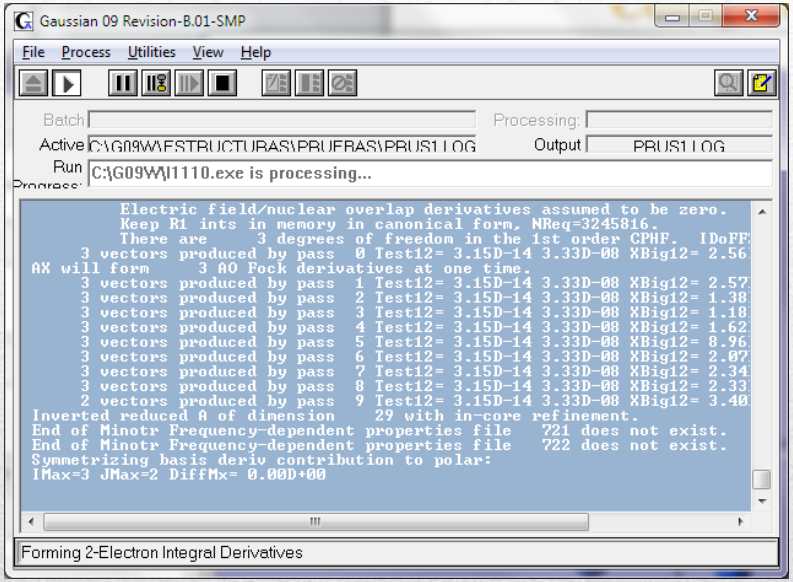
Configuración y Ejecución de Cálculos Simples

Benceno

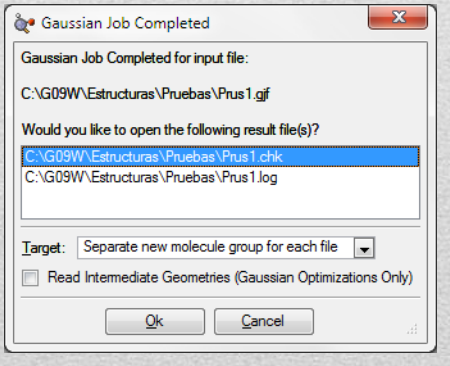




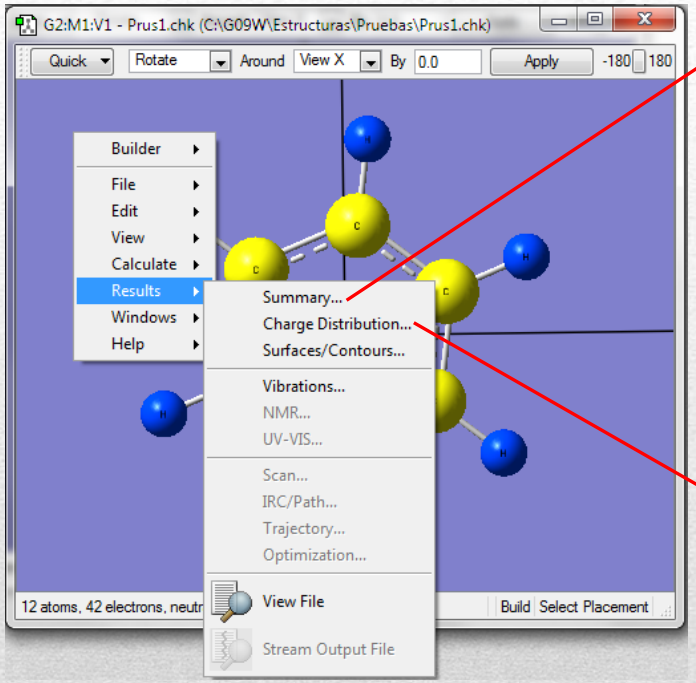


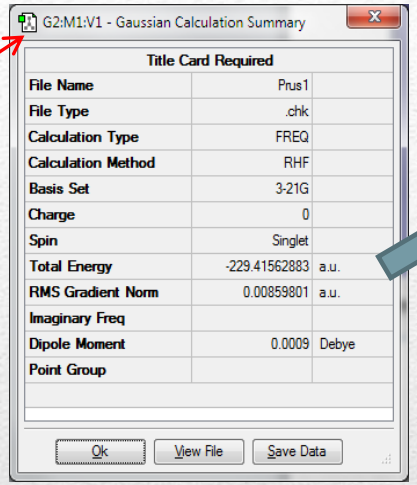


MEDIDOR DE CPU

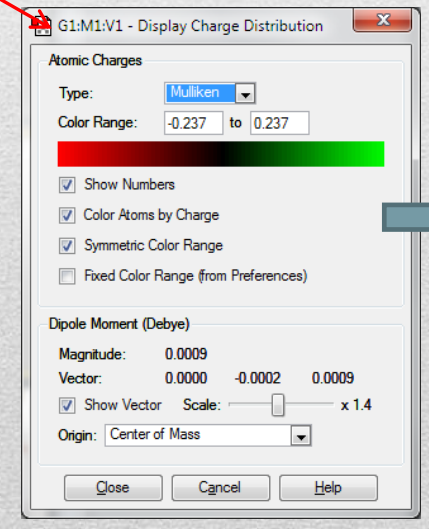


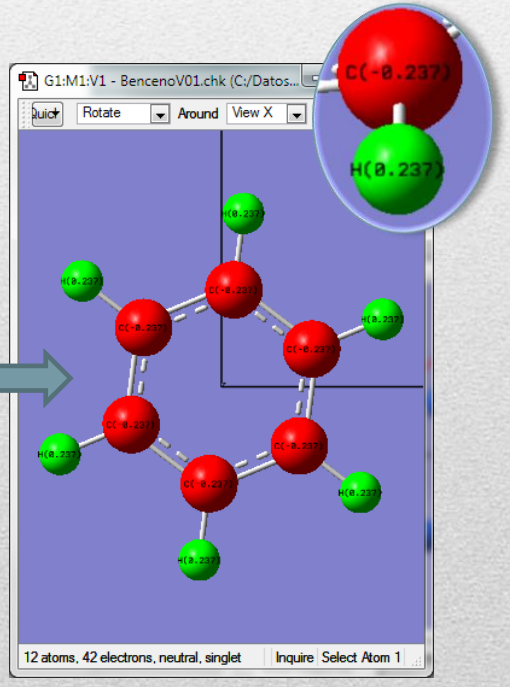
ANÁLISIS DE RESULTADOS: Resumen y Distribución de Carga





Energía Total de Punto Simple



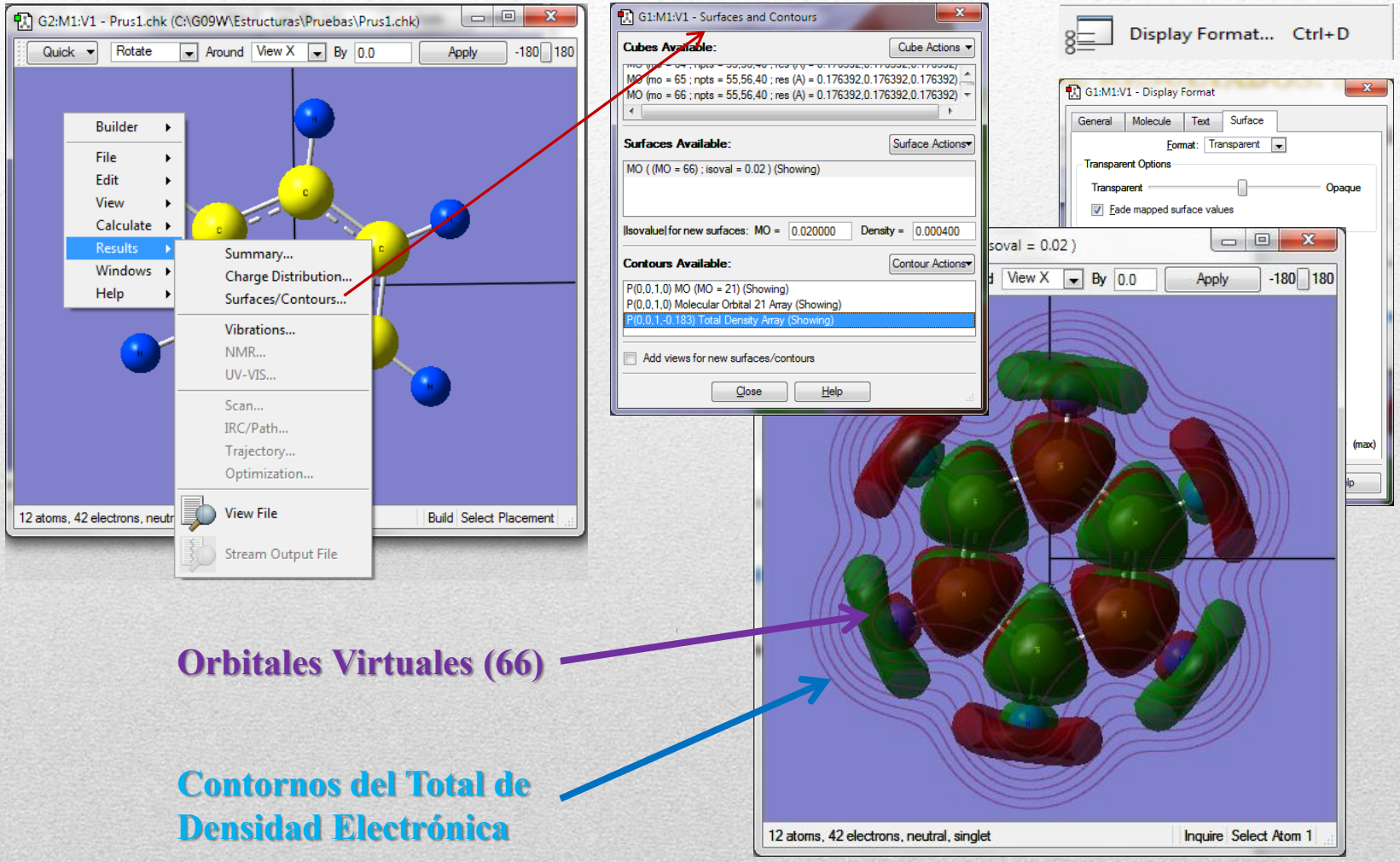


La electronegatividad no se puede medir experimentalmente de manera directa pero se puede determinar de manera indirecta efectuando cálculos a partir de otras propiedades atómicas o moleculares.

La escala Mulliken promedia la Afinidad Electrónica y los Potenciales de Ionización

$$c_M = \frac{A.E + P.I.}{2}$$

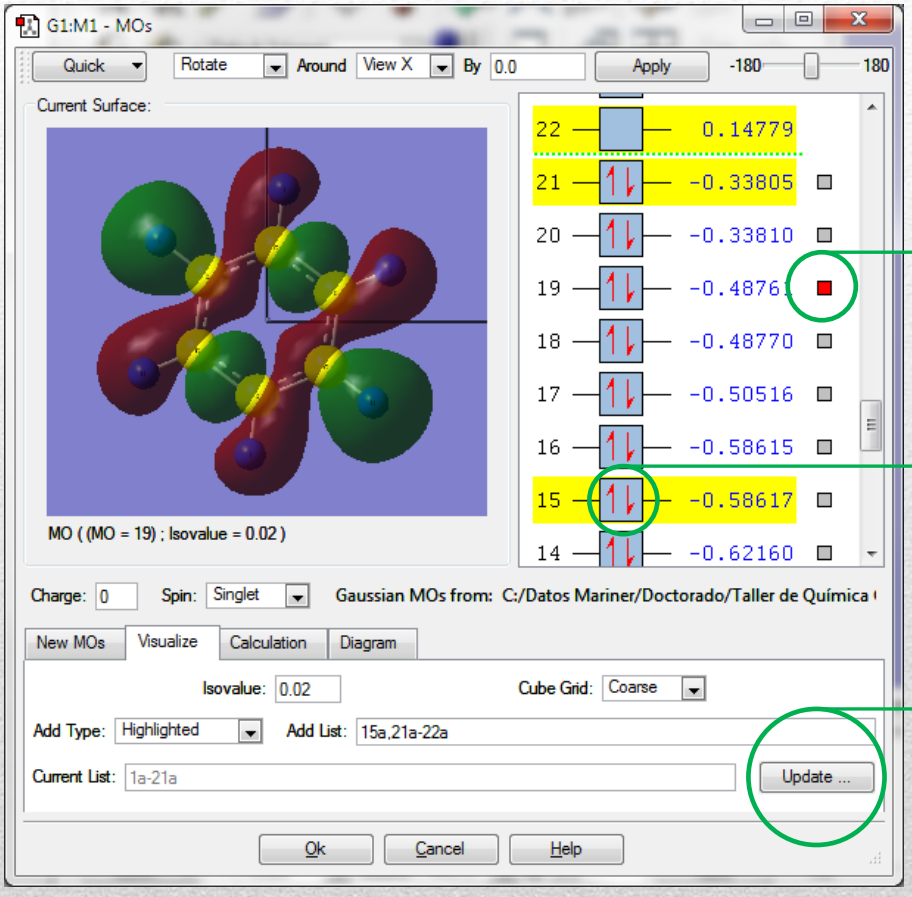
Orbitales HOMO y LUMO: Superficies y Contornos



Orbitales Virtuales (66)

Contornos del Total de Densidad Electrónica

ANÁLISIS DE RESULTADOS: Orbitales Moleculares

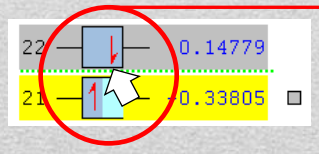


Herramienta para edición del Desplegado de Orbitales Moleculares

Orbitales Desplegados

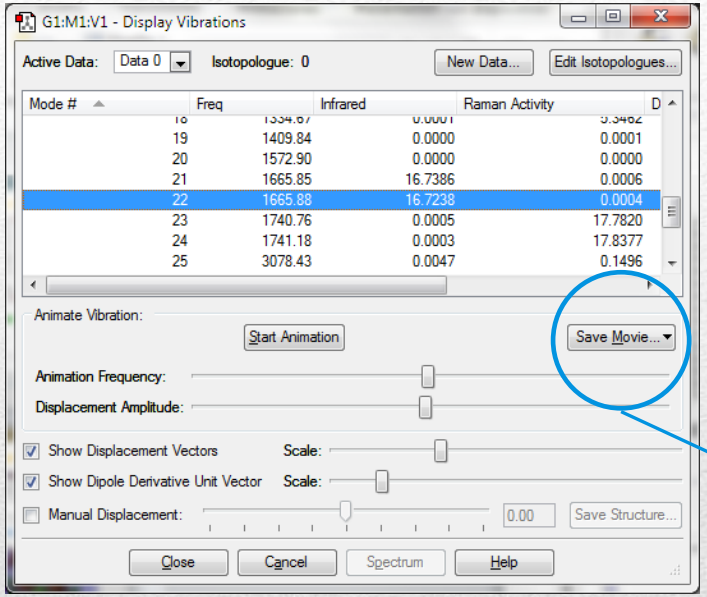
Nivel Ocupado

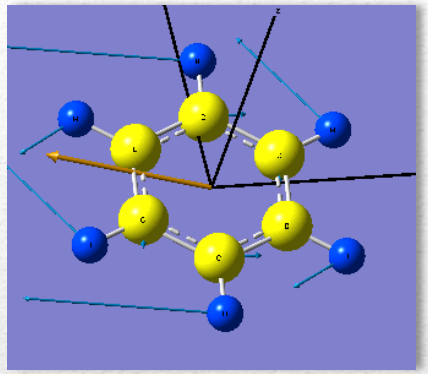
Actualización del Cálculo



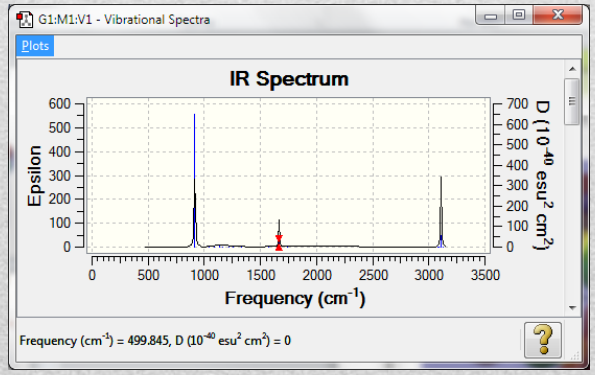
Se pueden modificar las ocupaciones manualmente para explorarlas.

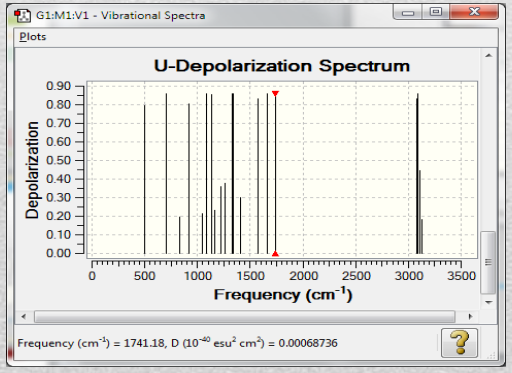
Modos de Vibración

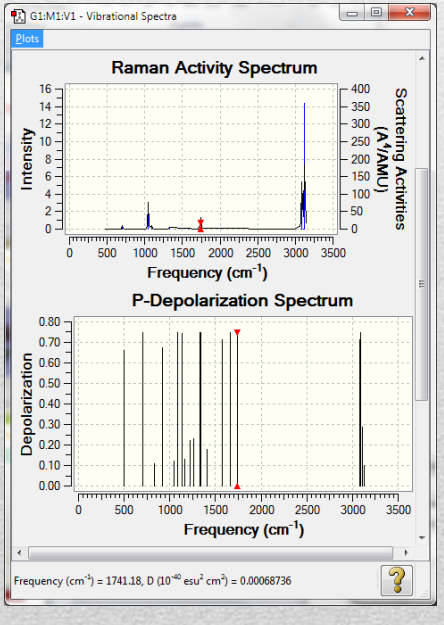




Almacena un
Archivo de Video



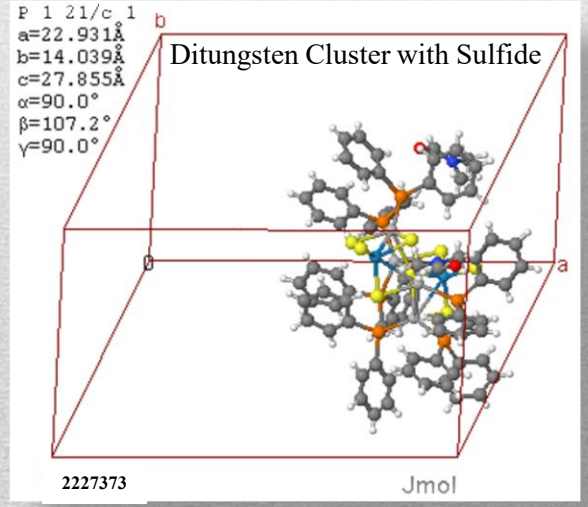




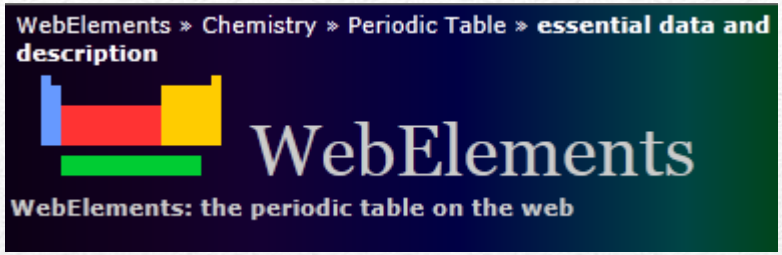
CUARTA SESIÓN

CONTENIDO

1. Simulación de Cristales.
2. Bases de Datos de Cristalografía.
3. Visualización en Jmol.
4. Archivos .cif



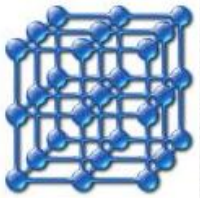
SIMULACIÓN DE CRISTALES



Internet Explorer http://www.webelements.com/

Estructura Cristalina del Silicio

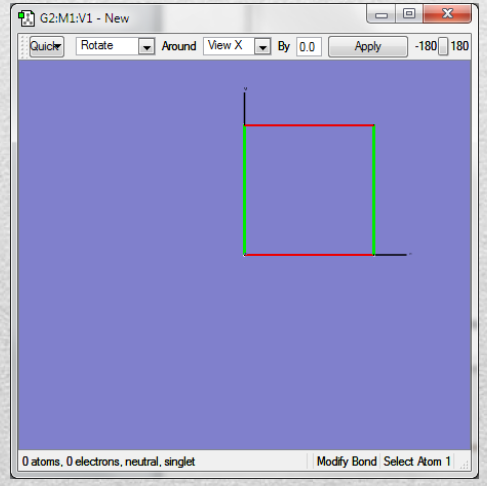
Space group: Fd-3m (Space group number: 227)
Structure: diamond
Cell parameters:
a: 543.09 pm
b: 543.09 pm
c: 543.09 pm
α: 90.000°
β: 90.000°
γ: 90.000°

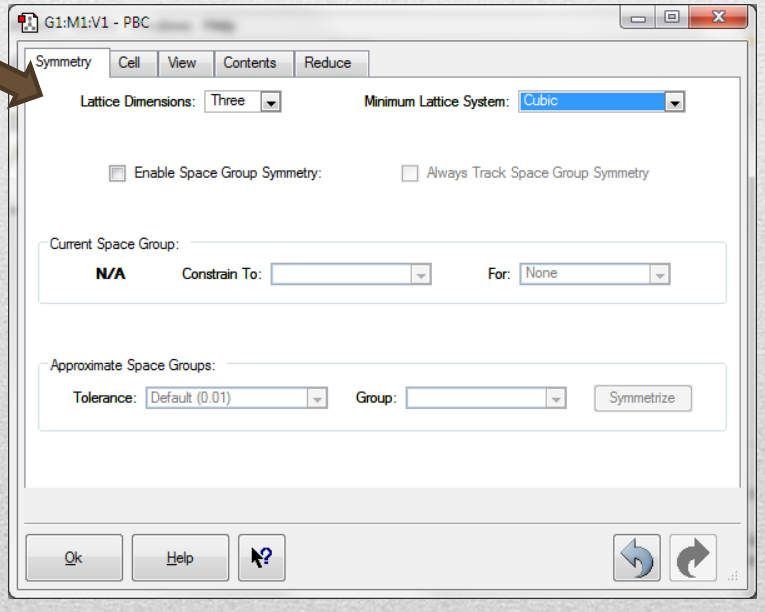


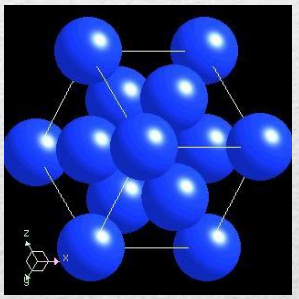
Silicio Cúbico

PBC Editor

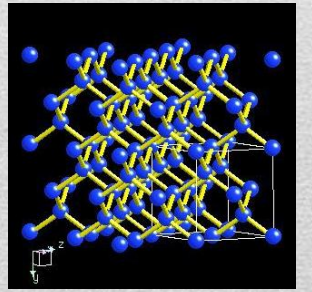
Editor de Cristales







Silicio Diamante



SIMULACIÓN DE CRISTALES: Silicio Cúbico

American Mineralogist Crystal Structure Database

This site is an interface to a crystal structure database that includes every structure published in the American Mineralogist, The Canadian Mineralogist, European Journal of Mineralogy and Physics and Chemistry of Minerals, as well as selected datasets from other journals. The database is maintained under the care of the Mineralogical Society of America and the Mineralogical Association of Canada, and financed by the National Science Foundation.

Silicon — Mineral

Author

Chemistry Search

Cell Parameters and Symmetry

Diffraction Search

General Search
Search Tips

Search | Reset

Logic interface: AND OR

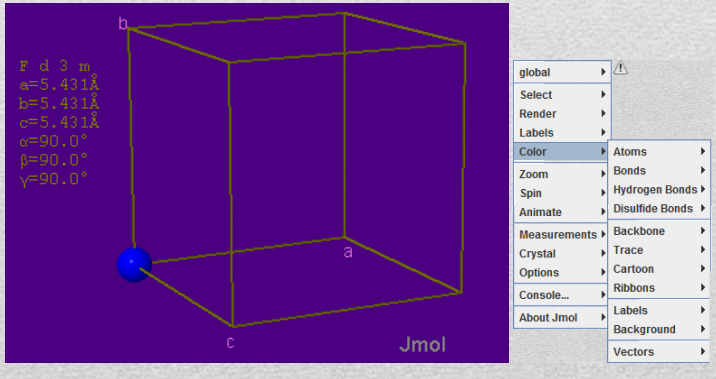
Viewing (About File Formats): amc long form | amc short form | cif

Download: amc | cif | diffraction data

http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php

Internet Explorer

UNIDAD MÍNIMA DE MATERIAL
Coordenadas Reducidas



18 matching records for this search.

Silicon

Kasper J S, Richards S M
Acta Crystallographica 17 (1964) 752-755
The crystal structures of new forms of silicon and germanium
Locality: synthetic
_database_code_amcsd 0009282
6.636 6.636 6.636 90 90 90 Ia3
atom x y z Biso
Si .1003 .1003 .1003 .89

Download AMC data (View Text File)
Download CIF data (View Text File)
Download diffraction data (View Text File)
View JMOL 3-D Structure

Silicon

Wyckoff R W G
Crystal Structures 1 (1963) 7-83
Second edition. Interscience Publishers, New York, New York
Sample at T = 300 K
_database_code_amcsd 0011243
5.43070 5.43070 5.43070 90 90 90 Fd3m
atom x y z
Si 0 0 0

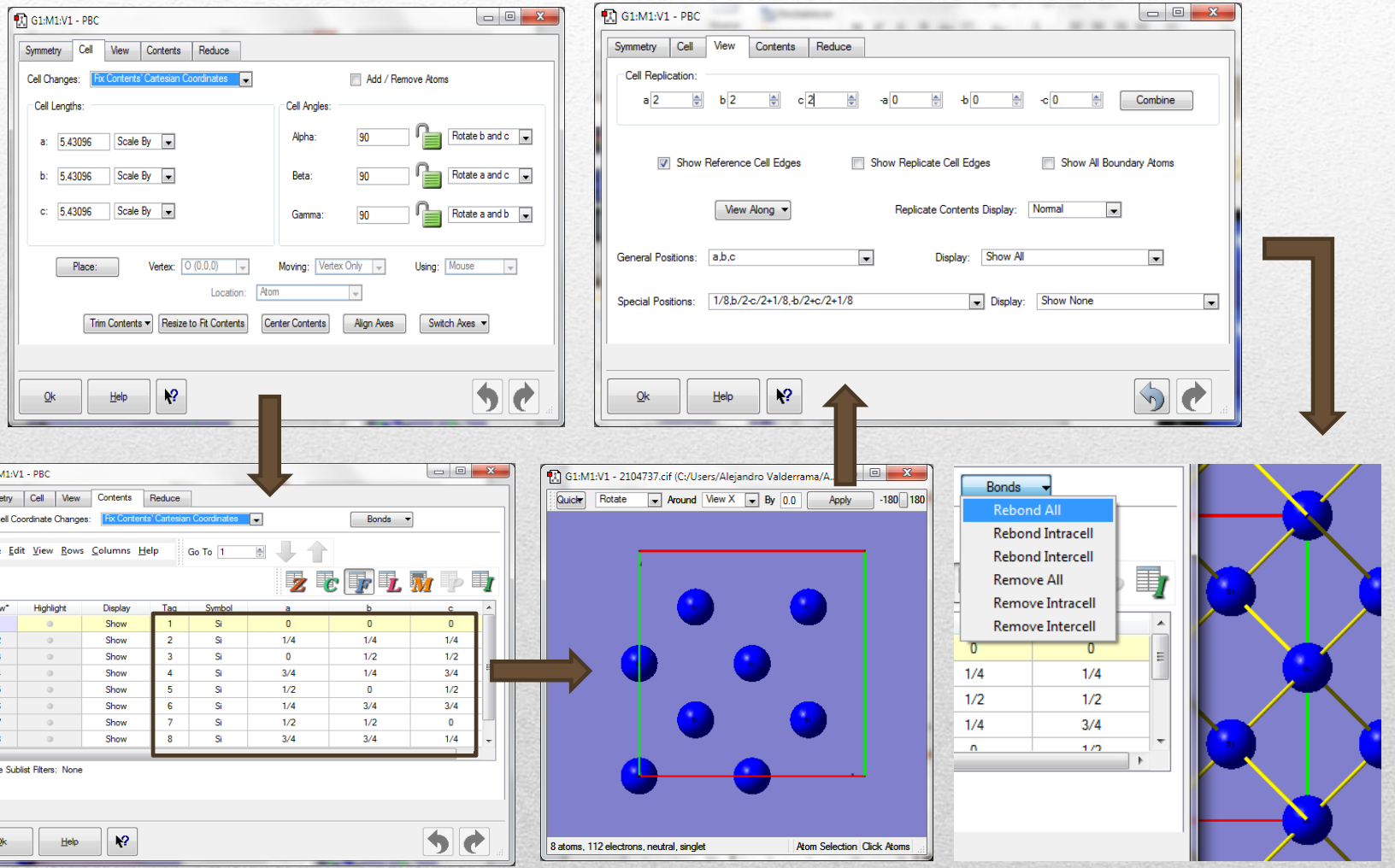
Download AMC data (View Text File)
Download CIF data (View Text File)
Download diffraction data (View Text File)
View JMOL 3-D Structure

Silicon

Wyckoff R W G
Crystal Structures 1 (1963) 7-83
Second edition. Interscience Publishers, New York, New York
Sample at T = 1573 K
_database_code_amcsd 0011244
5.43070 5.43070 5.43070 90 90 90 Fd3m
atom x y z
Si 0 0 0

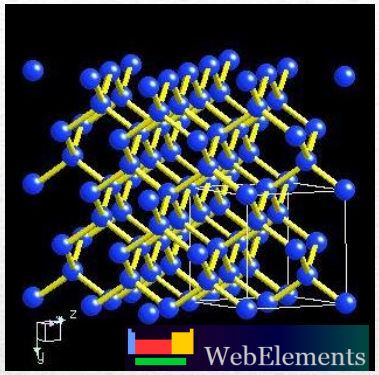
Download AMC data (View Text File)
Download CIF data (View Text File)
Download diffraction data (View Text File)
View JMOL 3-D Structure

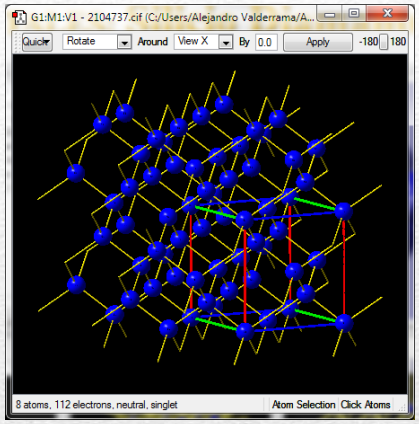
SIMULACIÓN DE CRISTALES: Silicio Diamante

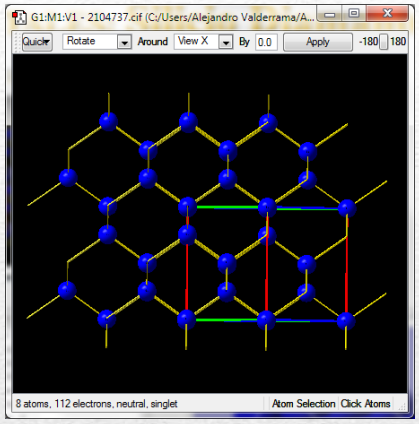


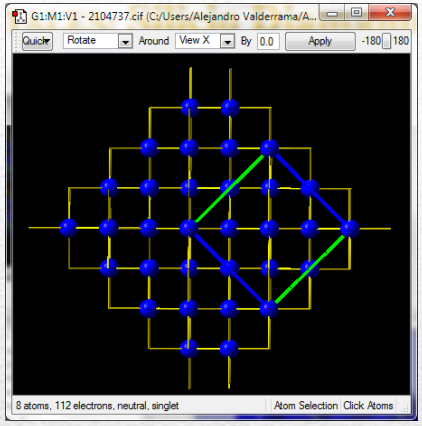
WebElements

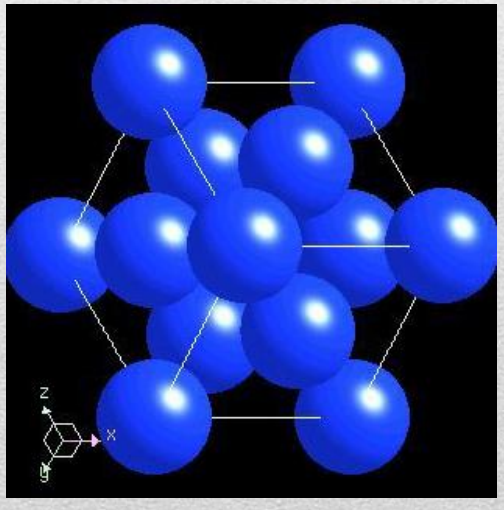
SIMULACIÓN DE CRISTALES: Silicio Diamante

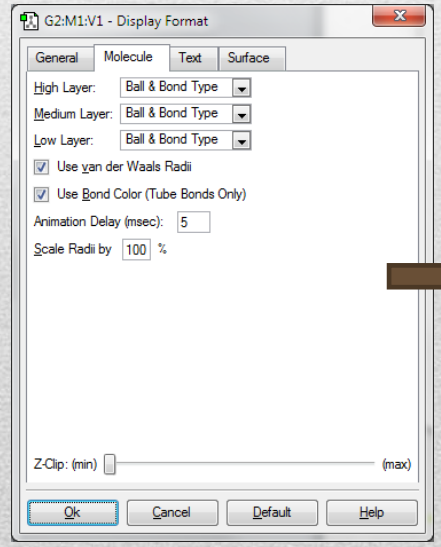


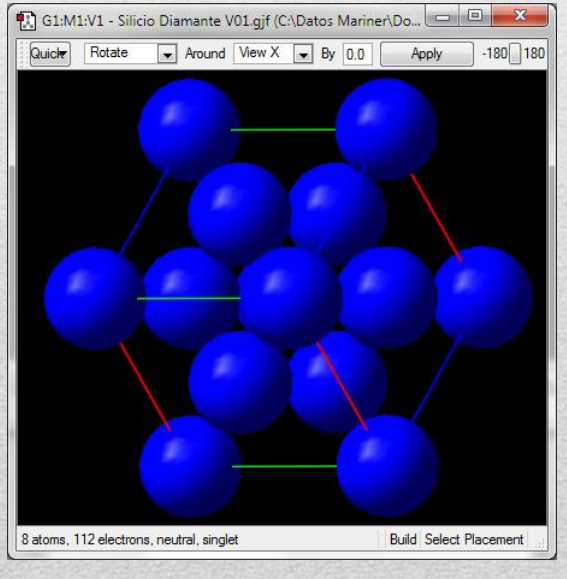












Crystallography Open Database

COD Home

Home
What's new?

Accessing COD Data

Browse
Search

Add Your Data

Deposit your data
Manage depositions
Manage/release prepublications
Upload data (closed)

Documentation

COD Wiki
Obtaining COD
Citing COD
COD Mirrors
Advices to donators

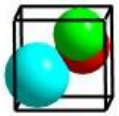
Open-access collection of crystal structures of organic, inorganic, metal-organic compounds and minerals, excluding biopolymers

All data on this site have been placed in the public domain by the contributors.

COD Advisory Board thanks The Research Council of Lithuania for their financial support of the publication *"Crystallography Open Database (COD): an open-access collection of crystal structures and platform for world-wide collaboration"*, *Nucleic Acids Research.* (2012) PDF version

We thank Crystal Impact GbR for their financial support of the publication *"Crystallography Open Database - an open-access collection of crystal structures"*, *J. Appl. Crystallogr.* (2009) PDF version

Currently there are **171005** entries in the COD.
Latest deposited structure: 3500009 on **2012-03-05** at **13:23:33 UTC**



CIFs Donators

http://cod.crystallography.net

BUSQUEDA DE CRISTALES: Carbono Diamante

Search

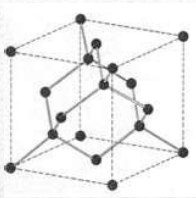
(Output limited to 300 entries maximum, see the hints and tips)

Search by COD ID	Search

Search by SMARTS	Search

Note: substructure search by SMARTS is currently available in a subset of COD containing 30 000 structures.

text (1 or 2 words)	Carbon Diamon
journal	
year	
volume	
issue	
1 to 8 elements	
NOT these elements	
volume min and max	
number of distinct elements min and max	
filters	has F_{obs}
Reset	Send



a (min - max)	
b	
c	
alpha	90 90
beta	90 90
gamma	90 90
filters	has F_{obs}
Reset	Send

All data on this site have been placed in the public domain by the contributors

http://cod.crystallography.net

Search Results

Result : There are 35 entries in the selection

You can download the COD numbers of the selection as a text file

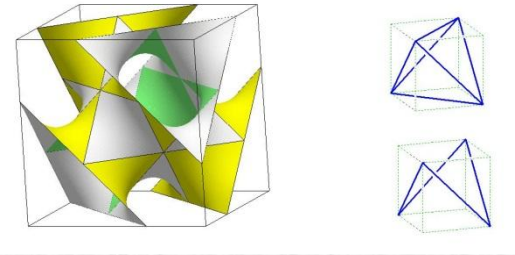
You can download all files as a single ZIP archive

Searching text contains Carbon Diamon

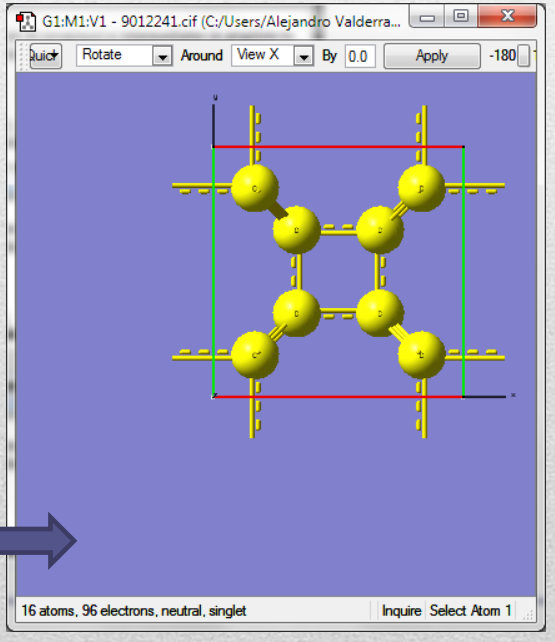
COD ID: 9012230	
CIF file	**Formula**: - C - **Comments**: Fayos, J. Possible 3D carbon structures as progressive intermediates in graphite to diamond phase transition Note: mathematical model Journal of Solid State Chemistry 148 (1999) 278-285 **Space group**: P 63 m c **Cell volume**: 35.184 **Cell parameters**: 2.461; 2.461; 6.708; 90; 90; 120;

COD ID: 9012231	
CIF file	**Formula**: - C - **Comments**: Fayos, J. Possible 3D carbon structures as progressive intermediates in graphite to diamond phase transition Note: mathematical model, phase: gra_crbl33_ch Journal of Solid State Chemistry 148 (1999) 278-285 **Space group**: C m m a **Cell volume**: 136.738 **Cell parameters**: 4.575; 5.304; 5.635; 90; 90; 90;

COD ID: 9012241	
CIF file	**Formula**: - C - **Comments**: Fayos, J. Possible 3D carbon structures as progressive intermediates in graphite to diamond phase transition Note: mathematical model, phase: supercubane Journal of Solid State Chemistry 148 (1999) 278-285 **Space group**: I m -3 **Cell volume**: 78.403 **Cell parameters**: 4.28; 4.28; 4.28; 90; 90; 90;



Fase de transición grafito → diamante



http://cod.crystallography.net

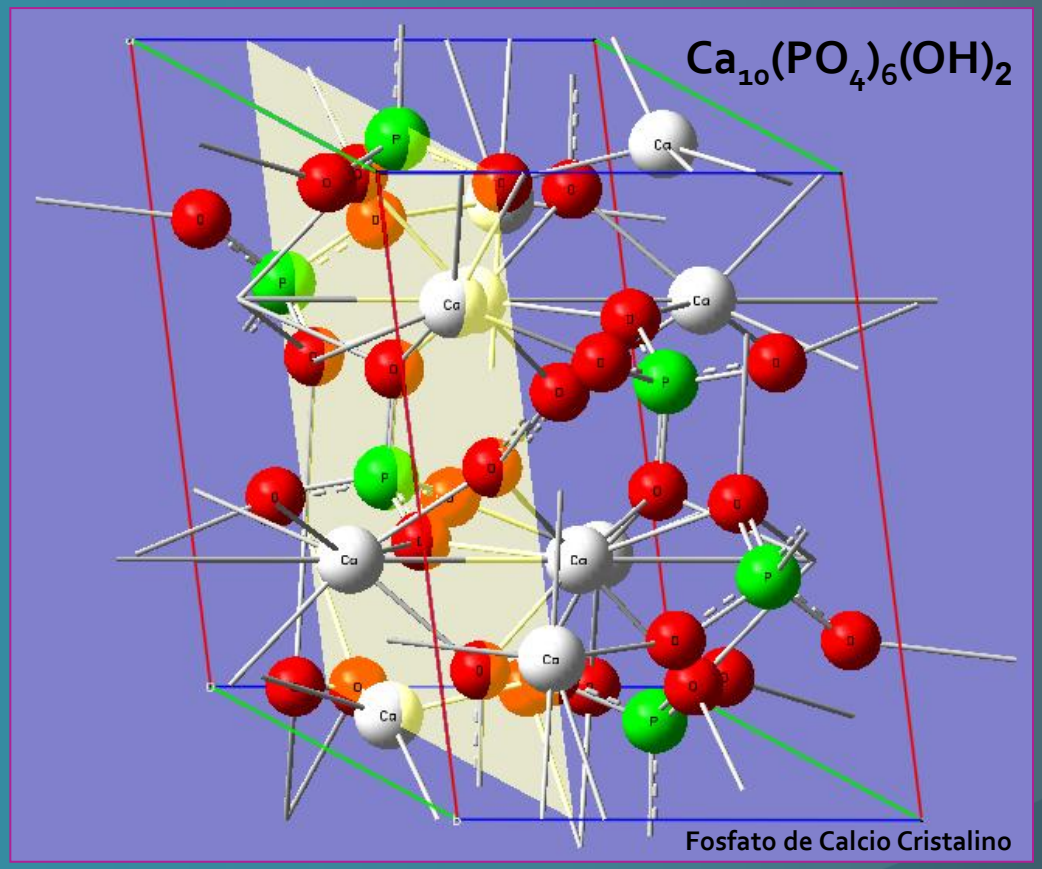
CRISTAL DE HIDOXIAPATITA

Crystallography Open Database

http://cod.crystallography.net

COD ID: 4317043

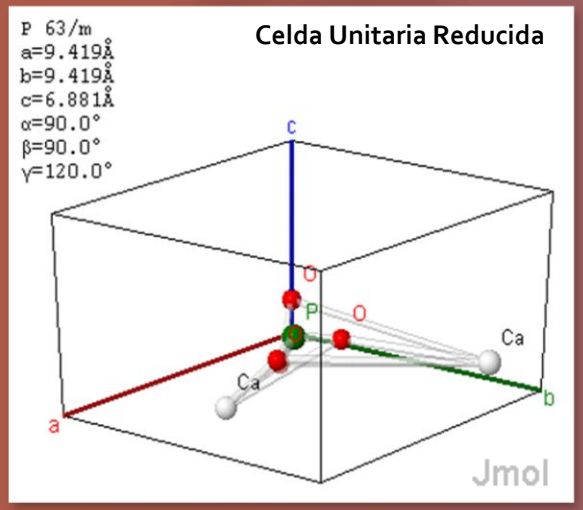
Formula: - Ca10 H2 O26 P6 -
Comments: Lyudmyla I. Ardanova; Evgeni I. Get'man; Stanislav N. Loboda; Vadim V. Prisedsky; Tatiana V. Tkachenko; Valeriy I. Marchenko; Valeriy P. Antonovich; Nataliya A. Chivireva; Konstantin A. Chebishev; Alexandra S. Lyashenko Isomorphous Substitutions of Rare Earth Elements for Calcium in Synthetic Hydroxyapatites Inorganic Chemistry 49 (2010) 10687-10693
Space group: P 63/m
Cell volume: 528.69
Cell parameters: 9.41898; 9.41898; 6.88119; 90; 90; 120;



Tag*	Symbol	a	b	c
1	Ca	2/3	1/3	0.997000
2	Ca	0.246300	0.992100	1/4
3	P	0.399100	0.369500	1/4
4	O	0.325800	0.489500	1/4
5	O	0.586600	0.464300	1/4
6	O	0.346400	0.259600	0.061400
7	O	0	0	0.182000
8	Ca	1/3	2/3	0.497000
9	Ca	1/3	2/3	0.003000
10	Ca	2/3	1/3	0.503000
11	Ca	0.254200	0.246300	3/4
12	Ca	0.007900	0.254200	1/4
13	Ca	0.753700	0.007900	3/4
14	Ca	0.745800	0.753700	1/4
15	Ca	0.992100	0.745800	3/4
16	P	0.029600	0.399100	3/4
17	P	0.630500	0.029600	1/4
18	P	0.600900	0.630500	3/4
19	P	0.970400	0.600900	1/4
20	P	0.369500	0.970400	3/4
21	O	0.836300	0.325800	3/4
22	O	0.510500	0.836300	1/4
23	O	0.674200	0.510500	3/4
24	O	0.163700	0.674200	1/4
25	O	0.489500	0.163700	3/4
26	O	0.122300	0.586600	3/4
27	O	0.535700	0.122300	1/4
28	O	0.413400	0.535700	3/4
29	O	0.877700	0.413400	1/4
30	O	0.464300	0.877700	3/4
31	O	0.086800	0.346400	0.561400
32	O	0.740400	0.086800	0.061400
33	O	0.653600	0.740400	0.561400
34	O	0.913200	0.653600	0.061400
35	O	0.259600	0.913200	0.561400
36	O	0.653600	0.740400	0.938600
37	O	0.913200	0.653600	0.438600
38	O	0.259600	0.913200	0.938600
39	O	0.346400	0.259600	0.438600
40	O	0.086800	0.346400	0.938600
41	O	0.740400	0.086800	0.438600
42	O	0	0	0.682000
43	O	0	0	0.818000
44	O	0	0	0.318000

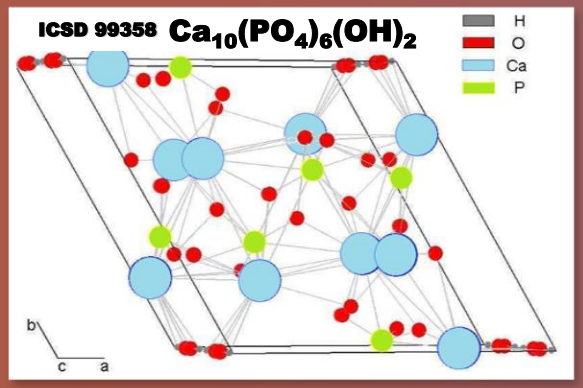
CRISTAL DE HIDOXIAPATITA

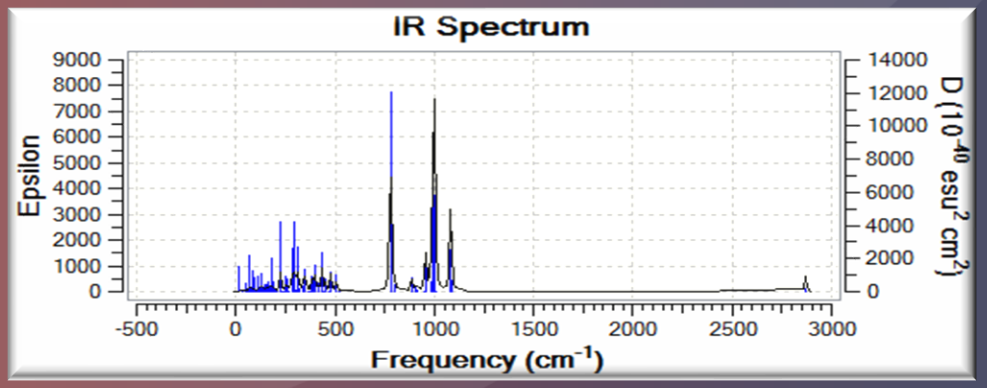
Crystallography Open Database



Structure parameters

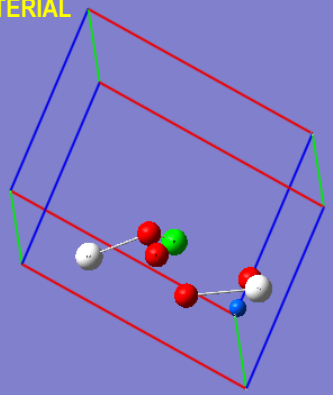
Formula	- Ca10 H2 O26 P6 -
Calculated formula	- Ca10 O26 P6 -
Authors of publication	Lyudmyla I. Ardanova
Journal of publication	Inorganic Chemistry
a	9.41898 ± 0.00019 Å
b	9.41898 ± 0.00019 Å
c	6.88119 ± 0.00017 Å
α	90°
β	90°
γ	120°
Cell volume	528.69 ± 0.02 Å³
Cell temperature	296 K
Ambient diffraction temperature	296 K
Number of distinct elements	4
Hermann-Mauguin symmetry space group	P 63/m
Hall symmetry space group	-P 6c
Residual factor R(I) for significantly intense reflections	7.7502
Goodness-of-fit parameter for all reflections	1.1644
Diffraction radiation wavelength	1.5418 Å
Diffraction radiation type	CuKα



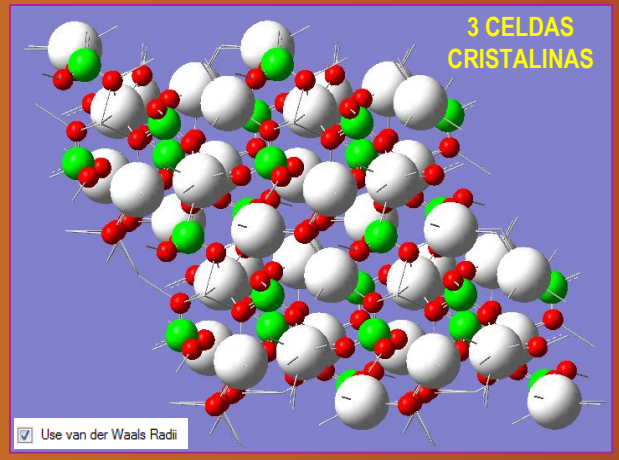


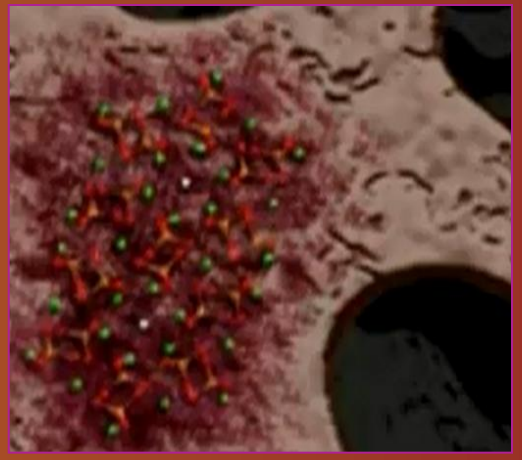
CRISTAL DE HIDOXIAPATITA

UNIDAD MÍNIMA DE MATERIAL
Coordenadas Reducidas



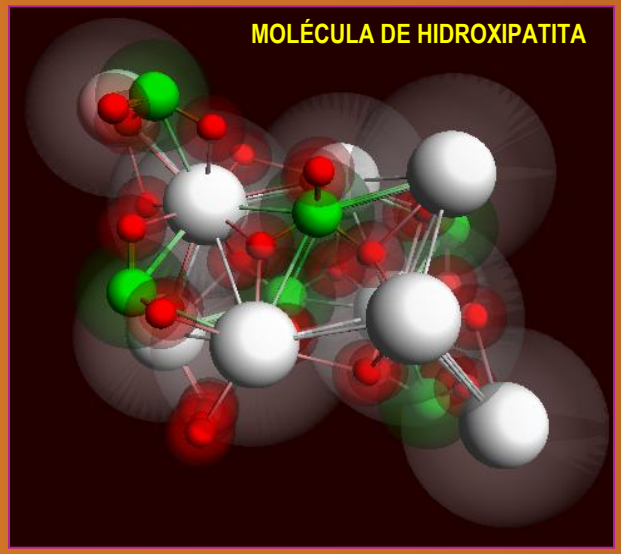
Ca	0.6666	0.3333	0.0016
Ca	-0.0070	0.2416	0.2500
P	0.3694	0.3984	0.2500
O	0.4859	0.3273	0.2500
O	0.4666	0.5882	0.2500
O	0.2575	0.3414	0.0707
H	0.0000	0.0000	0.2500

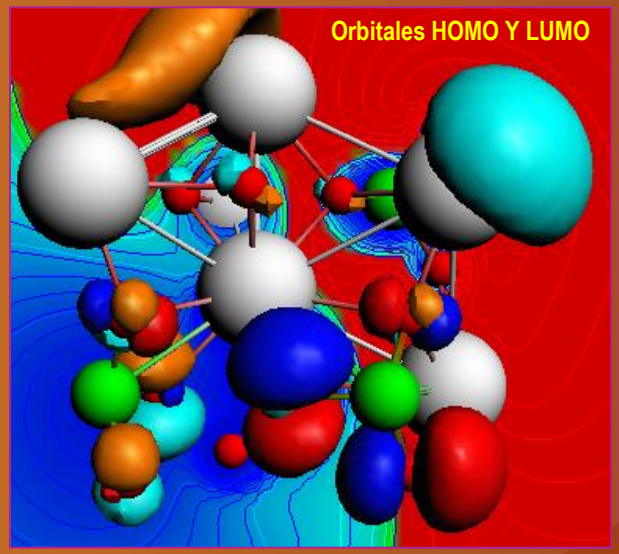


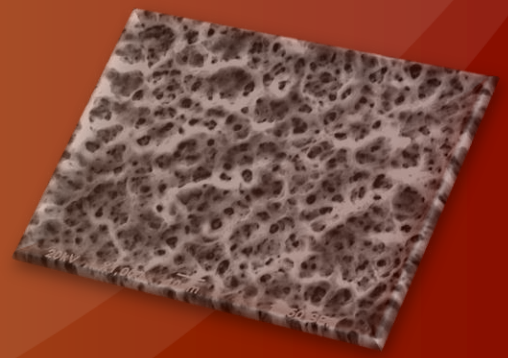


ESTRUCTURA MOLECULAR

El componente inorgánico de la matriz ósea está constituido en su mayor parte por fosfato cálcico en forma de cristales de hidroxiapatita.







ESTRUCTURA MICROSCÓPICA

Ti5a (T=265°C, H_3PO_4=0.14% y Ca/P=1.00)

QUINTA SESIÓN

CONTENIDO

1. Supercómputo
2. Introducción Quantum Espresso.
3. Archivos de entrada y salida.
4. Instalación de Visualizadores.
5. Visualización.

1. Supercómputo

ÍNDICE

Instalación del Cliente.

Instalación de la Terminal y del Sistema de Transferencia de Archivos.

Conexión a la Supercomputadora.

Comandos UNIX para Miztli.

Uso de Quantum Espresso.

Instalación del Cliente VPN

1. **Acceder a la carpeta de recursos:**

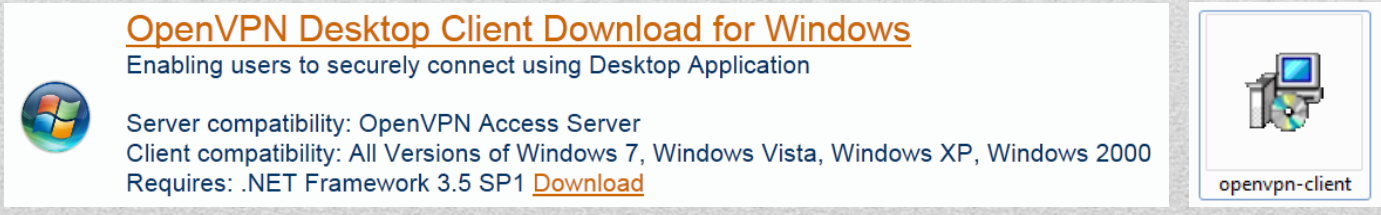
   SuperPCeIM2016\01 Conexión vpnsuper_2015_WIN

1. **Copiarla a la unidad local: C:\Supercómputo\01…**
   Contiene los archivos de cliente y certificado: ca.crt y client.ovpn.

3. **Seguir las instrucciones de instalación:**
   (copiarla del archivo: Ligas de Instalación VPN)

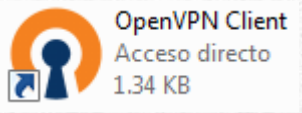
http://openvpn.net/index.php/access-server/download-openvpn-as-sw/357.html

4. **Descargar e instalar el Desktop Client:**

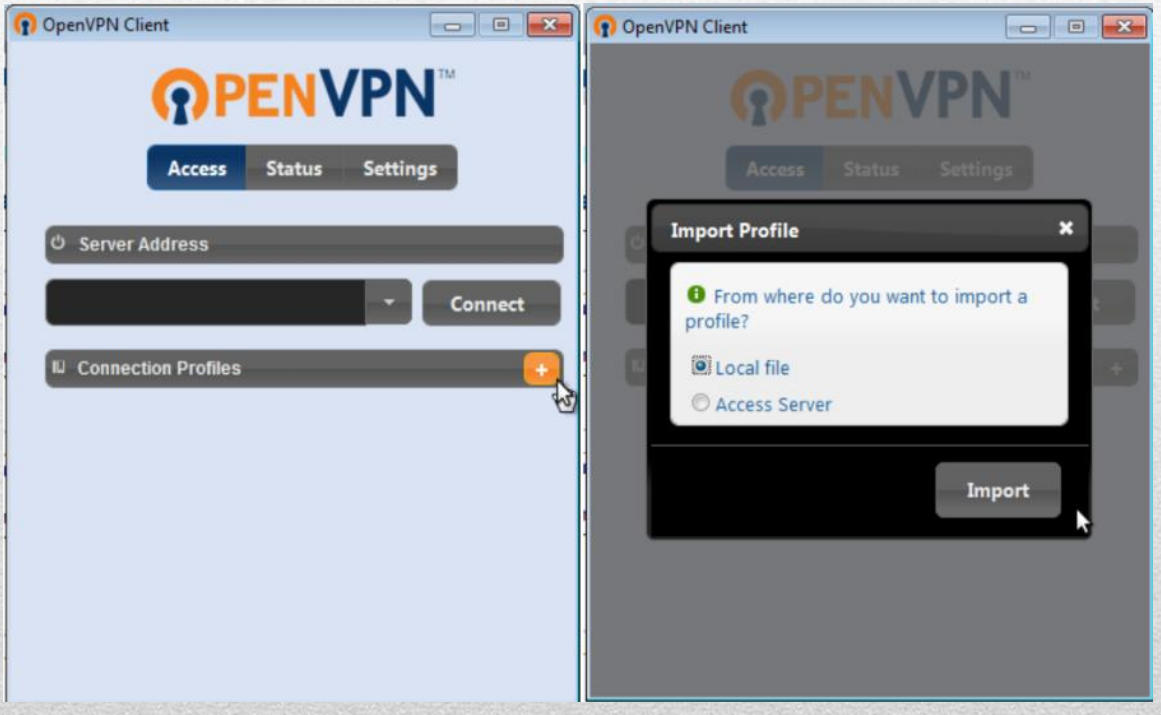


Instalación del Cliente VPN

5. **Ejecutar el Cliente instalado:**



6. **Importar el perfil de Cliente:**



Que se encuentra en la subcarpeta: `C:\Supercómputo\VPN's`

1. Instalación del Cliente VPN

7. Conectar el cliente a la Supercomputadora NES:

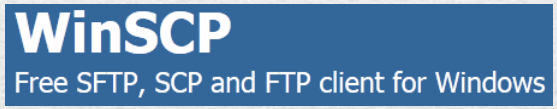
Con la dirección IP: `132.247.177.99`
Username: `******`
Password: `$es8nva)ontraC`

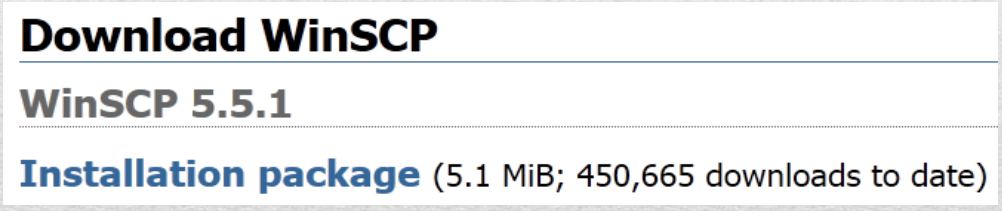
Instalación de la Terminal y STA

1. **De manera similar a los pasos anteriores instalar :**
   (copiando las ligas correspondientes del archivo:
   Ligas de Instalación VPN)

La Terminal de Operación SSH
http://putty.softonic.com/

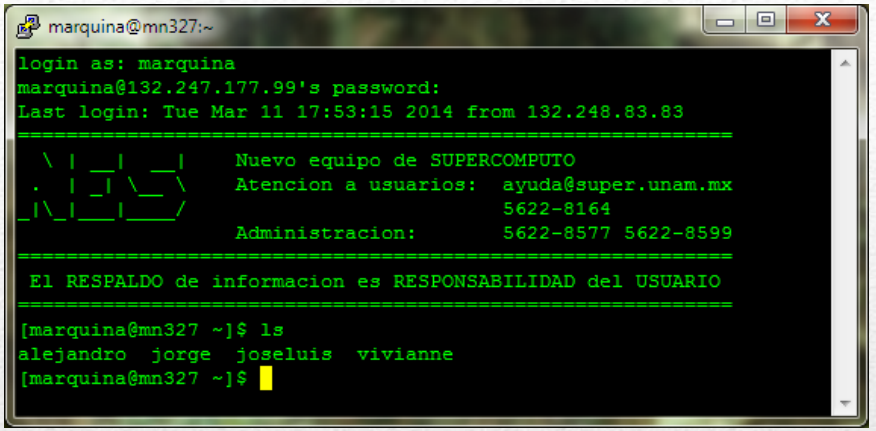
El Sistema de Transferencia de Archivos
http://winscp.net/eng/download.php

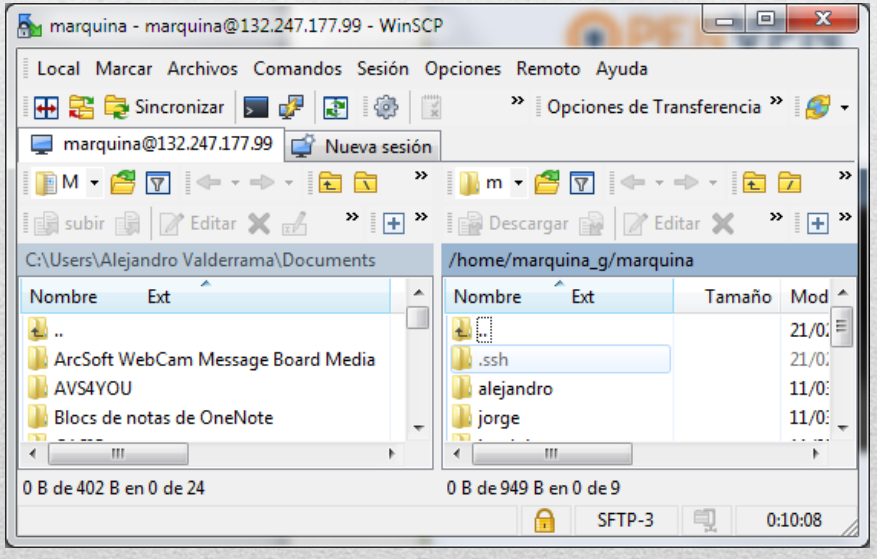




2. **Ejecutar la Terminal y el Sistema de Transferencia de Archivos.**
   Con la dirección IP: 132.247.177.99
   Username: *****
   Password: eBDIy24%mnD67

Conexión a la Supercomputadora





COORDINACIÓN DE SUPERCÓMPUTO
Correo electrónico: **ayuda@super.unam.mx**
Teléfono: **5622-8529**

Comandos UNIX para MIZTLI

ÓRDENES BÁSICAS DEL SISTEMA		
ACCIÓN	ORDEN	EJEMPLO
Muestra el nombre de usuario actual.	whoami	whoami↵
Muestra la fecha y hora actuales.	date	date↵
Muestra la lista de procesos en ejecución.	top	top↵ [Ctrl]+z
Limpia la pantalla.	clear	clear↵
Cierra la cesión con la supercomputadora. (Puede requerirse ejecutarla un par de veces).	logout	logout↵
Cierra la sesión y la ventana de terminal. (Puede requerirse ejecutarla un par de veces).	exit	exit↵

Comandos UNIX para MIZTLI

MANEJO DE ARCHIVOS Y DIRECTORIOS		
ACCIÓN	ORDEN	EJEMPLO
Lista el contenido del directorio actual.	ls	ls↵
Crea un archivo de texto. **Salva el texto editado.** **Cierra el editor de archivos.**	emacs *nombre_de_archivo*	emacs archivo1↵ [Ctrl]+x+s [Ctrl]+z
Muestra el contenido de un archivo de texto.	cat *nombre_de_archivo*	cat archivo1↵
Crea un directorio.	mkdir *nombre_de_directorio*	mkdir prueba↵
Entra al directorio especificado.	cd *nombre_de_directorio*	cd prueba↵
Sube un nivel en el árbol de directorios.	cd ..	cd ..↵
Copia un archivo con otro nombre en el mismo directorio.	cp *nombre_de_archivo nuevo_nombre*	cp archivo1 archivo2↵
Borra un archivo.	rm *nombre_de_archivo*	rm archivo1↵
Borra un directorio vacío	rmdir *nombre_de_directorio*	rmdir prueba↵
Borra todo el contenido de un directorio incluyendo archivos y subdirectorios.	rm * -r	rm * -r↵

Comandos UNIX para MIZTLI

MANEJO DE PROCESOS		
ACCIÓN	ORDEN	EJEMPLO
Muestra los módulos precargados con configuraciones de ambiente para herramientas y aplicaciones.	module avail	module avail↵
Muestra el estatus de las colas de procesamiento.	qstat	qstat↵
Envia un archivo a una cola de procesamiento. Crea un "job".	bsub < nombre_de_archivo	bsub < job1↵
Muestra los trabajos que han sido enviados a las colas de procesamiento.	bjobs	bjobs↵
Quita un trabajo o job de una cola.	bkill numero_de_job	bkill 116329↵
Convierte un archivo de texto a formato unix y conviene correrlo antes de mandar a proceso un archivo.	dos2unix nombre_de_archivo	dos2unix *.in
Ejecuta un archivo de lotes o que contiene órdenes de consola.	bash nombre_de_archivo	bash archivo1↵

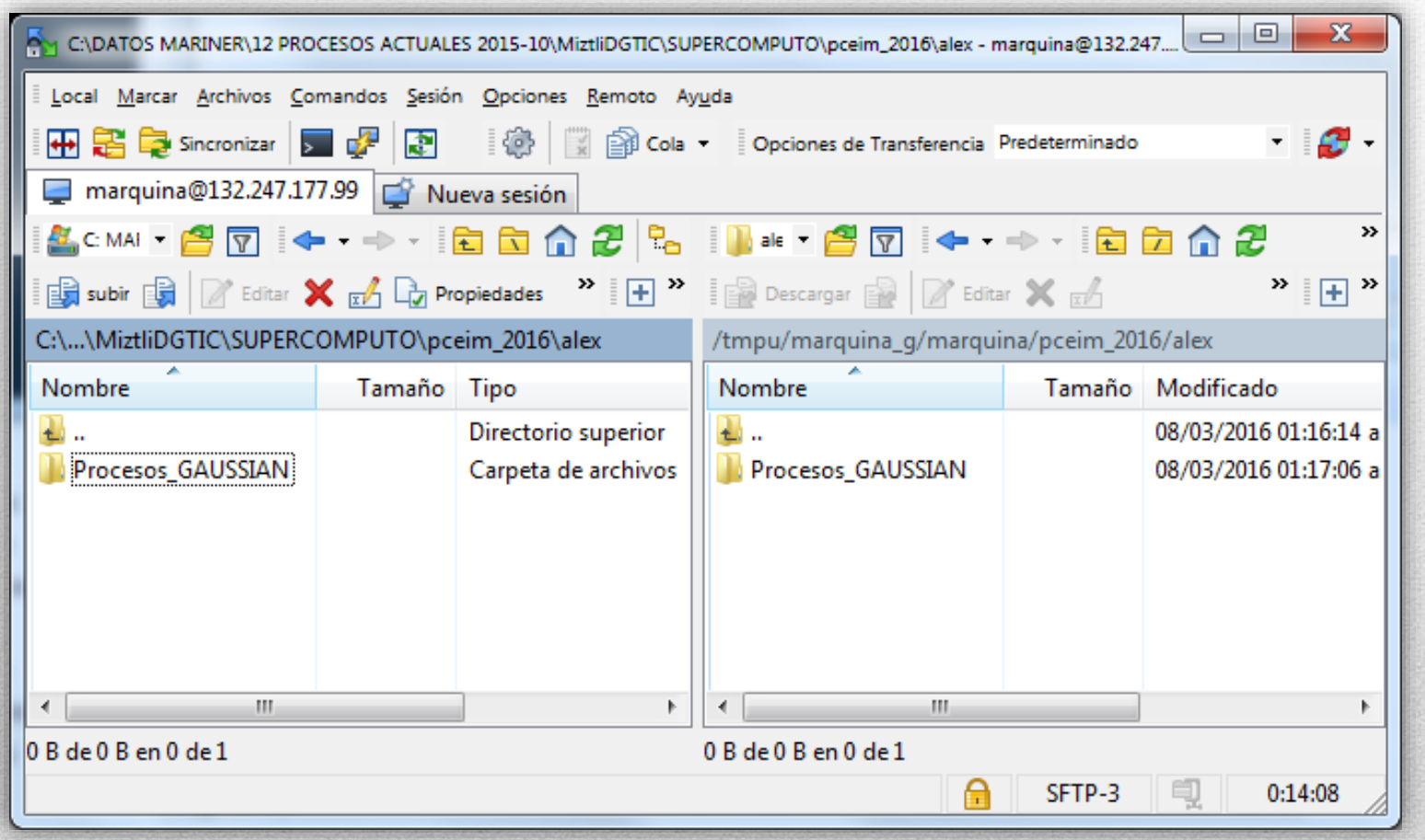
Algunas aplicaciones se encuentran instaladas en el sistema pero hay que cargar los módulos correspondientes para activarlas.
Este es el caso de Gaussian, de Quantum Espresso y los compiladores Fortran.

2. Gaussian en paralelo

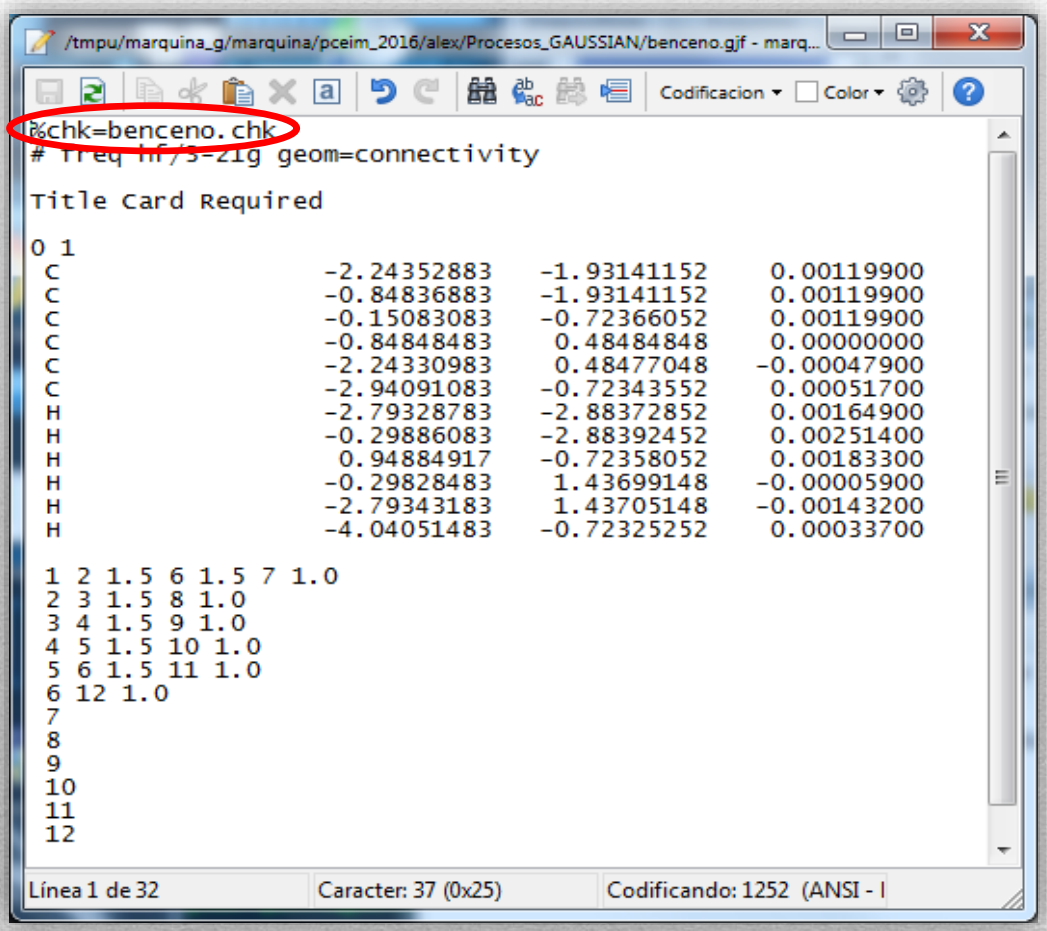
marquina@mn328:/tmpu/marquina_g/marquina/pceim_2016/alex/Procesos_GAUSSIAN

```
[marquina@mn328 ~]$ cd $TMPU
[marquina@mn328 marquina]$ ls
alejandro  joseluis  pceim_2016  radames  vivianne
[marquina@mn328 marquina]$ cd pceim_2016
[marquina@mn328 pceim_2016]$ ls
[marquina@mn328 pceim_2016]$ mkdir alex
[marquina@mn328 pceim_2016]$ cd alex
[marquina@mn328 alex]$ mkdir Procesos_GAUSSIAN
[marquina@mn328 alex]$ cd Procesos_GAUSSIAN
[marquina@mn328 Procesos_GAUSSIAN]$
```

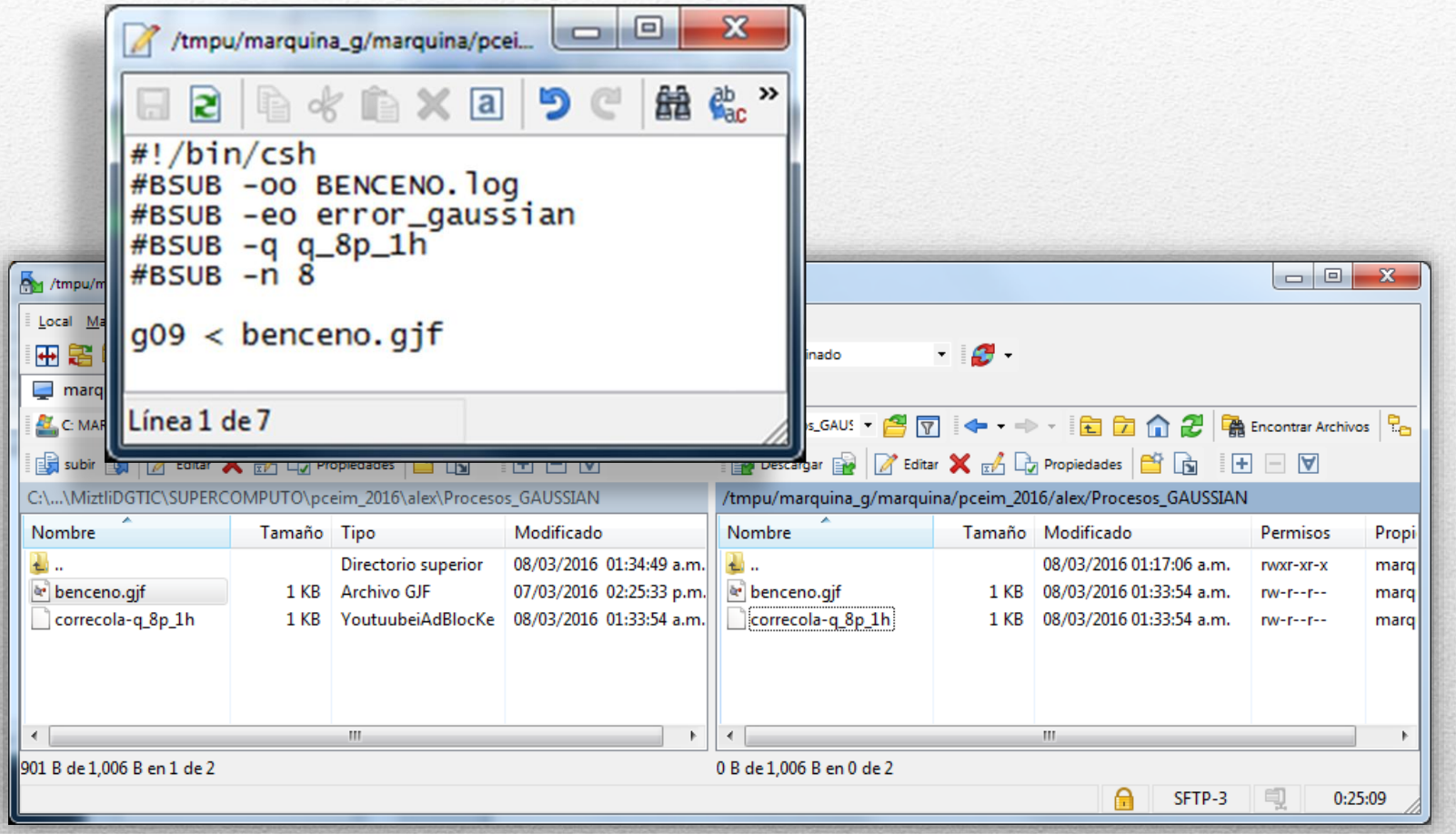
Usando el Manejador de archivos



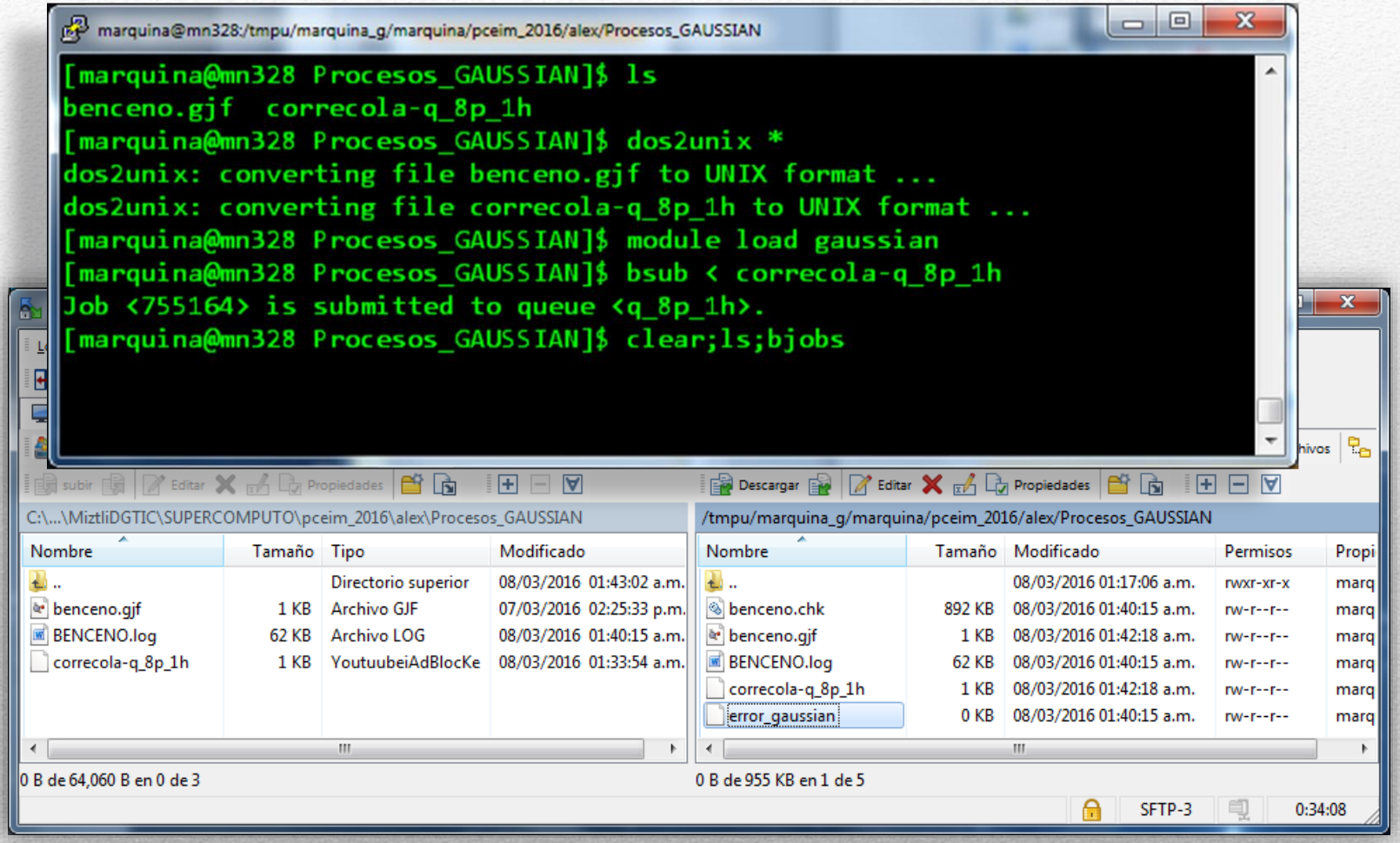
El script de Gaussian



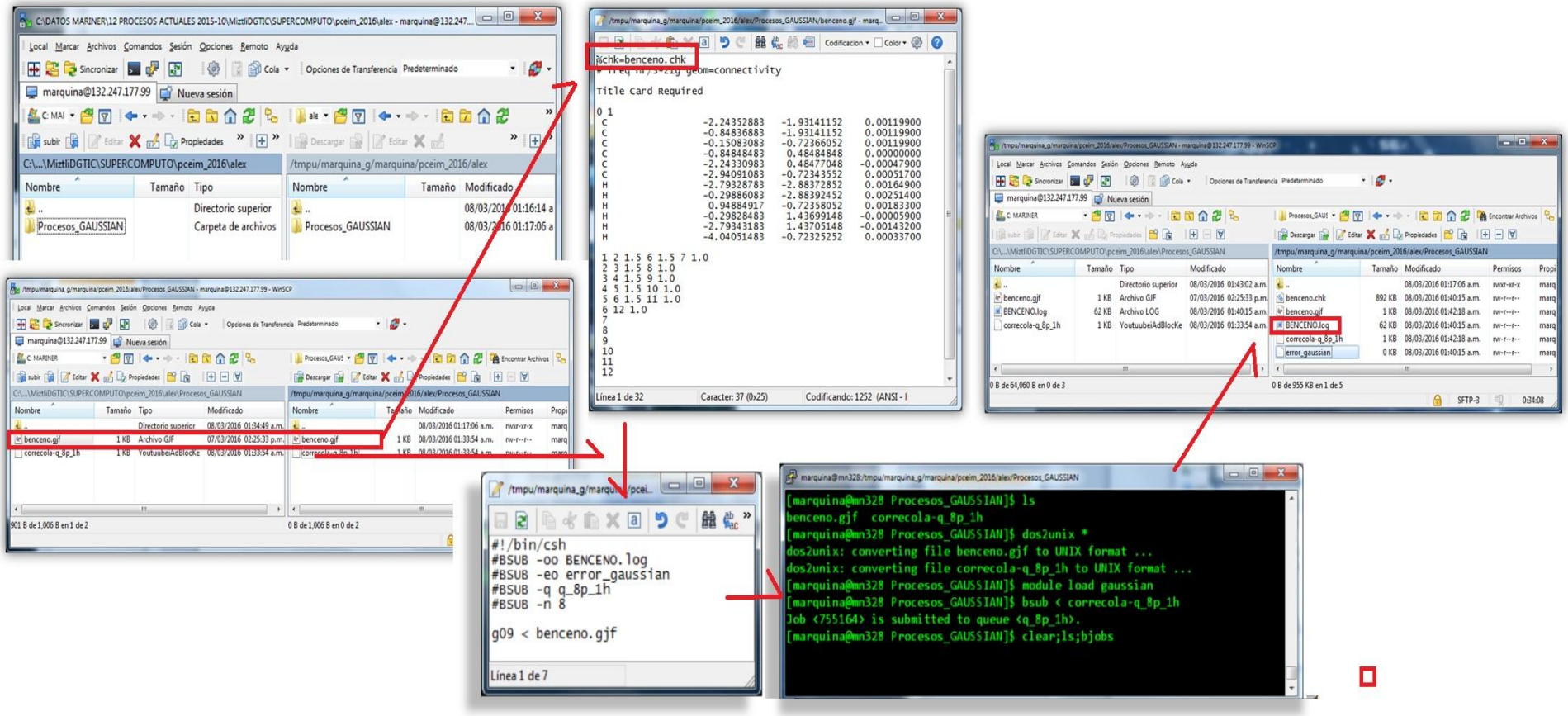
El archivo lanzador: correcola



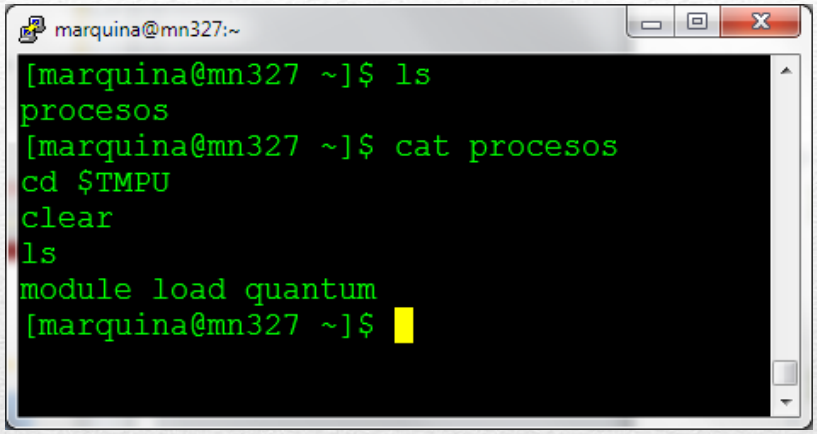
Ejecución del Script Gaussian:

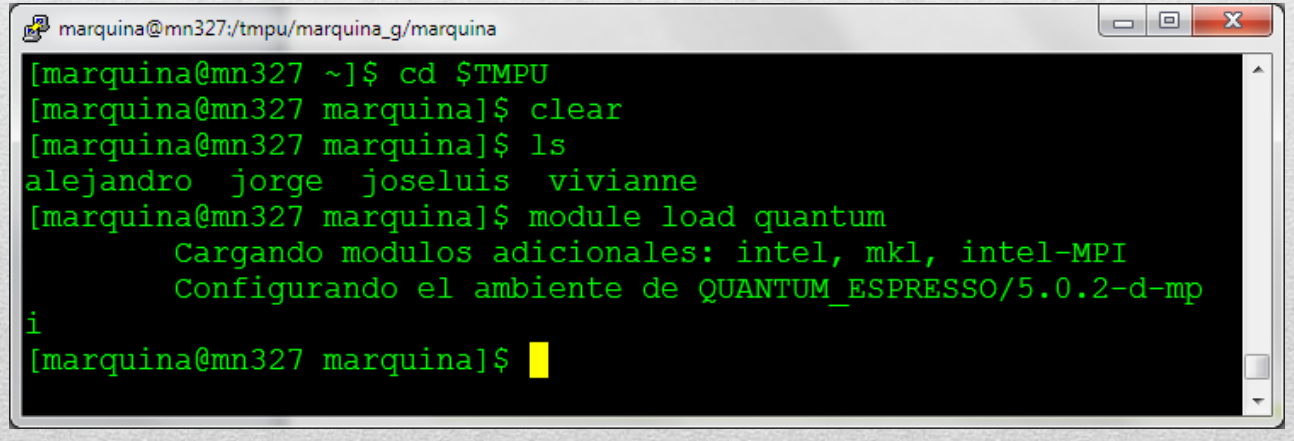


EN RESUMEN:

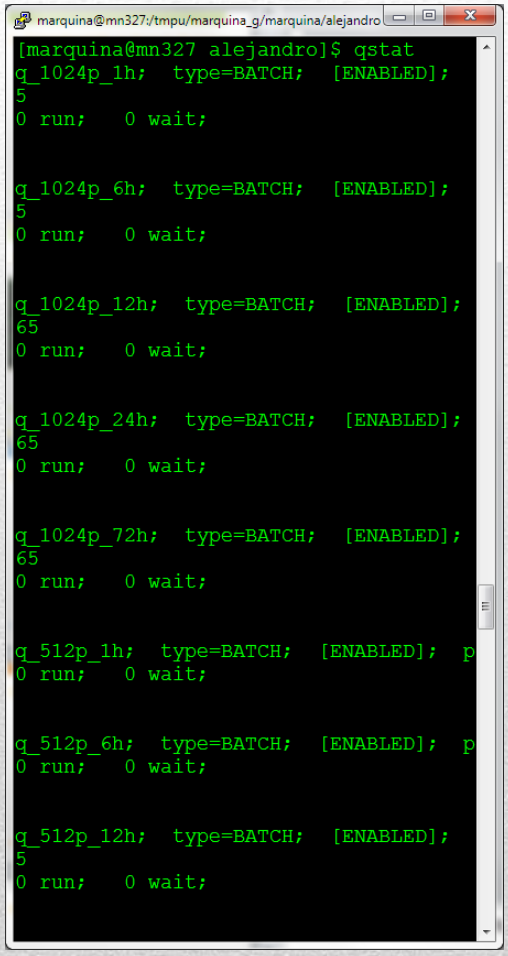

%chk=benceno.chk
Title Card Required
1 2 1.5 6 1.5 7 1.0
2 3 1.5 8 1.0
3 4 1.5 9 1.0
4 5 1.5 10 1.0
5 6 1.5 11 1.0
6 12 1.0
#!/bin/csh
#BSUB -oo BENCENO.log
#BSUB -eo error_gaussian
#BSUB -q q_8p_1h
#BSUB -n 8
g09 < benceno.gjf
[marquina@mn328 Procesos_GAUSSIAN]$ ls
benceno.gjf correcola-q_8p_1h
[marquina@mn328 Procesos_GAUSSIAN]$ dos2unix *
dos2unix: converting file benceno.gjf to UNIX format ...
dos2unix: converting file correcola-q_8p_1h to UNIX format ...
[marquina@mn328 Procesos_GAUSSIAN]$ module load gaussian
[marquina@mn328 Procesos_GAUSSIAN]$ bsub < correcola-q_8p_1h
Job <755164> is submitted to queue <q_8p_1h>.
[marquina@mn328 Procesos_GAUSSIAN]$ clear;ls;bjobs

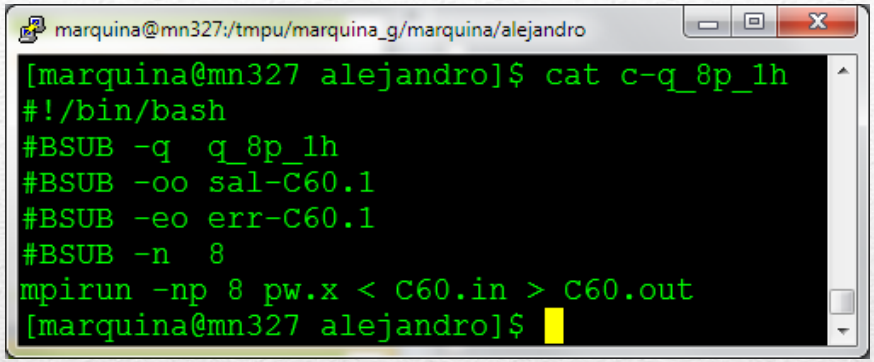
3. Introducción a Quantum Espresso

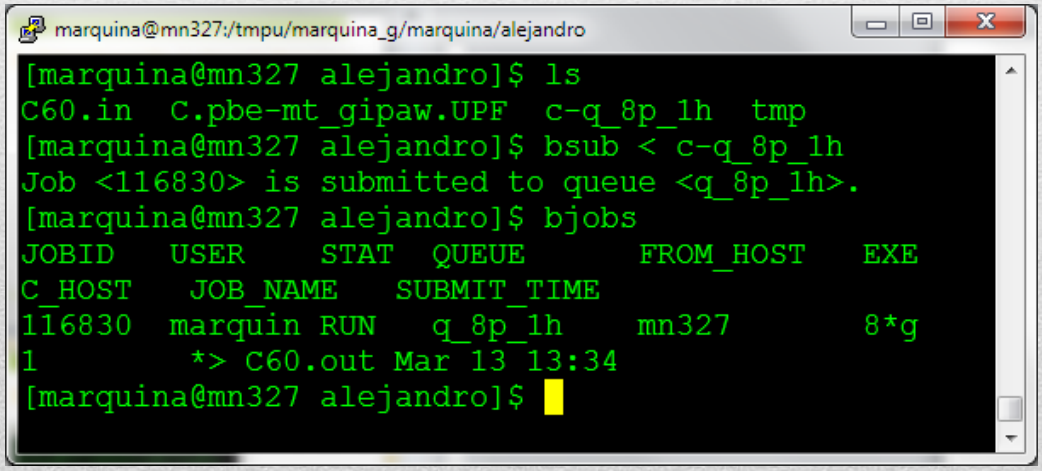




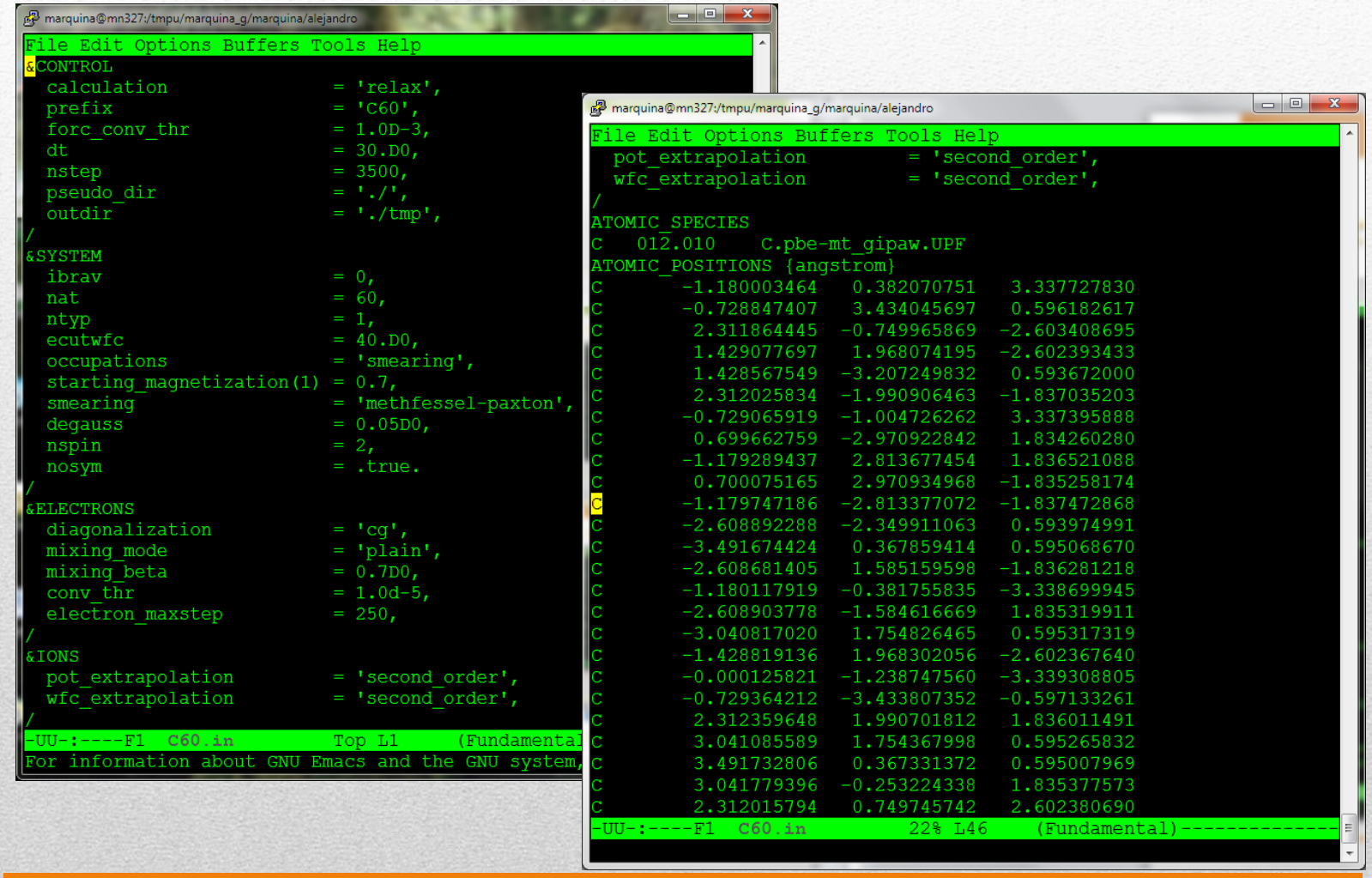
3. Introducción a Quantum Espresso



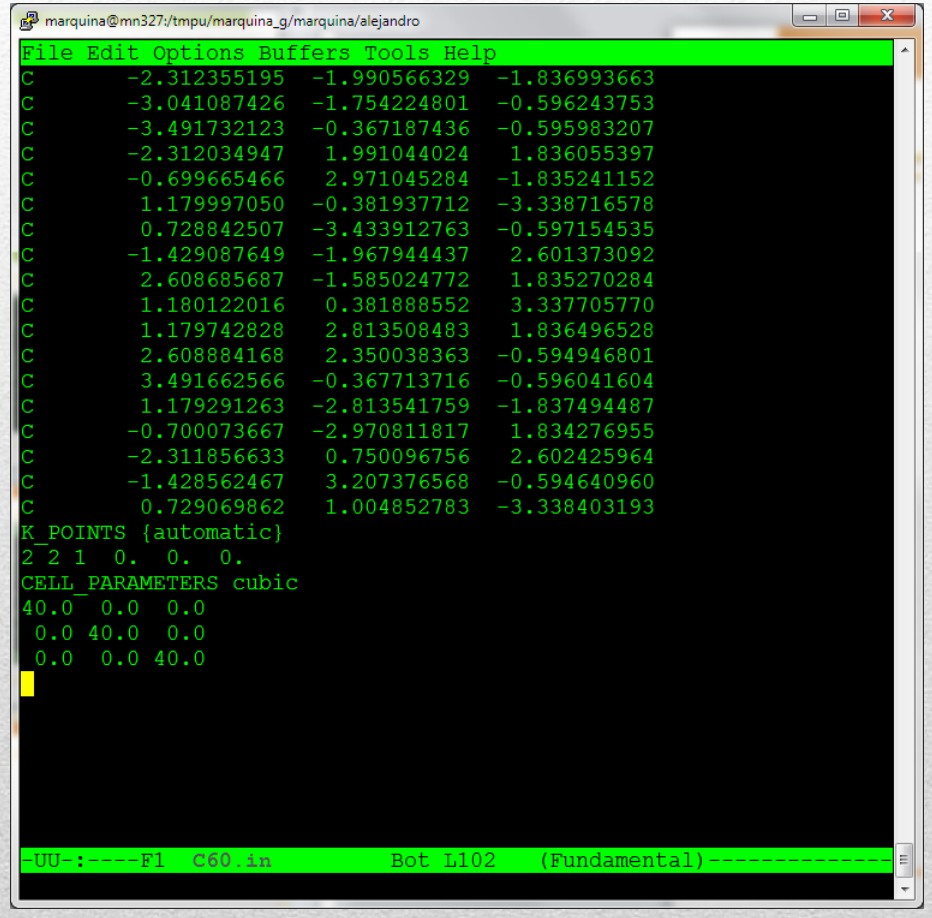




3. Archivos de entrada:



3. Archivos de entrada



3. El Script de Quantum Espresso

```
&CONTROL
  calculation      = 'relax',
  prefix           = 'C2',
  pseudo_dir       = './',
  outdir           = './tmp',
  tprnfor          = .true.
/
&SYSTEM
  ibrav            = 0,
  nat              = 2,
  ntyp             = 1,
  ecutwfc          = 100.D0,
  occupations      = 'smearing',
  smearing         = 'methfessel-paxton',
  degauss          = 0.05D0,
  nosym            = .true.
/
&ELECTRONS
  diagonalization = 'cg'
  conv_thr         = 1.0d-5
/
&IONS
/
ATOMIC_SPECIES
C   012.010   C.pz-rrkjus.UPF
ATOMIC_POSITIONS {angstrom}
C         0.000000000   0.000000000   0.000000000
C         1.240000000   0.000000000   0.000000000
K_POINTS {automatic}
2 2 1  0.5 0.5 0.5
CELL_PARAMETERS cubic
40.0  0.0  0.0
 0.0 40.0  0.0
 0.0  0.0 40.0
```

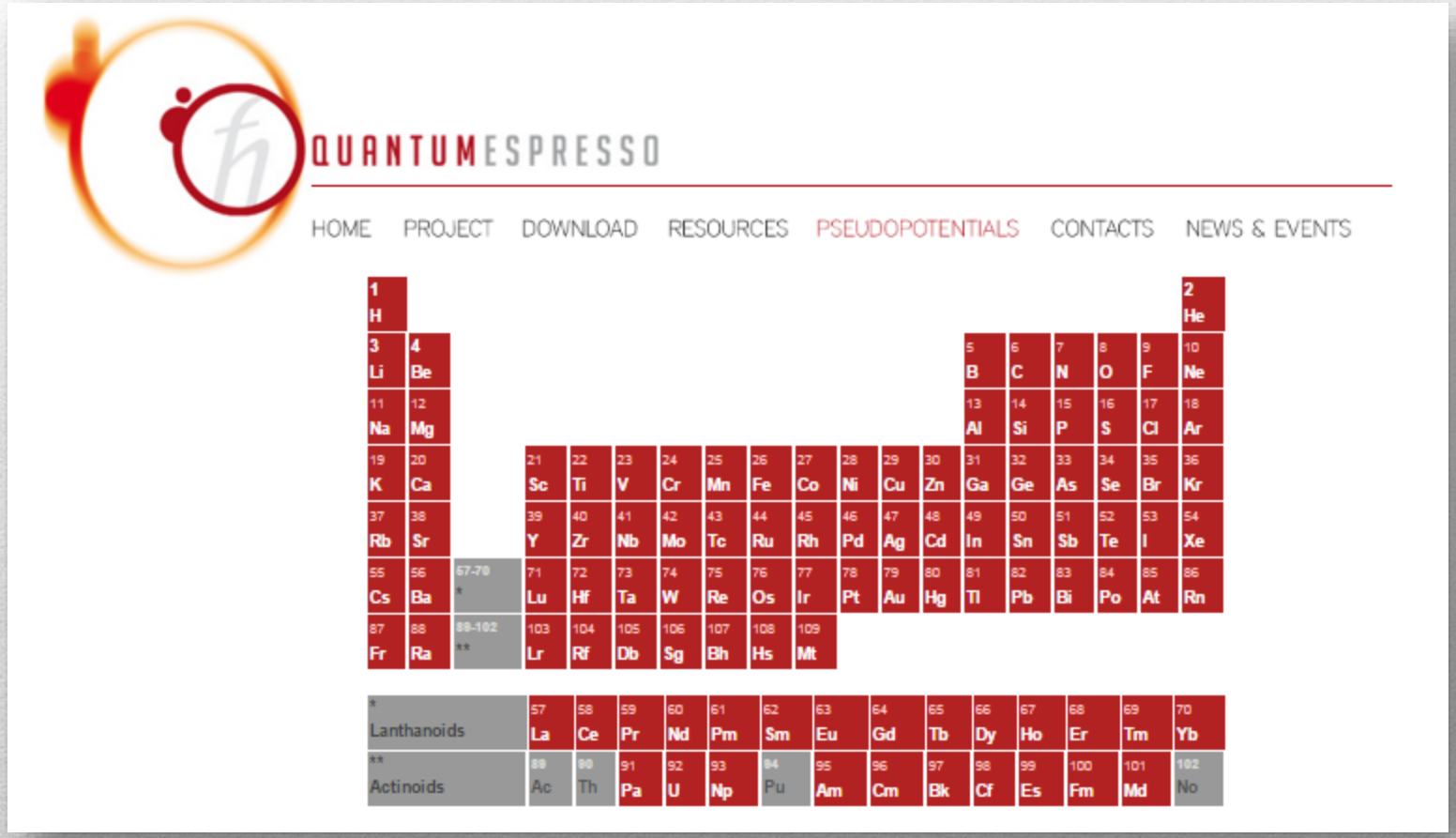
Archivo Lanzador Correcola-q_8p_1h

```
#!/bin/bash
#BSUB -q q_8p_1h
#BSUB -oo C2relax-sal.1
#BSUB -eo C2relax-ser.1
#BSUB -n 8
mpirun pw.x <C2relax.in> C2relax.out
```

SINGLE POINT

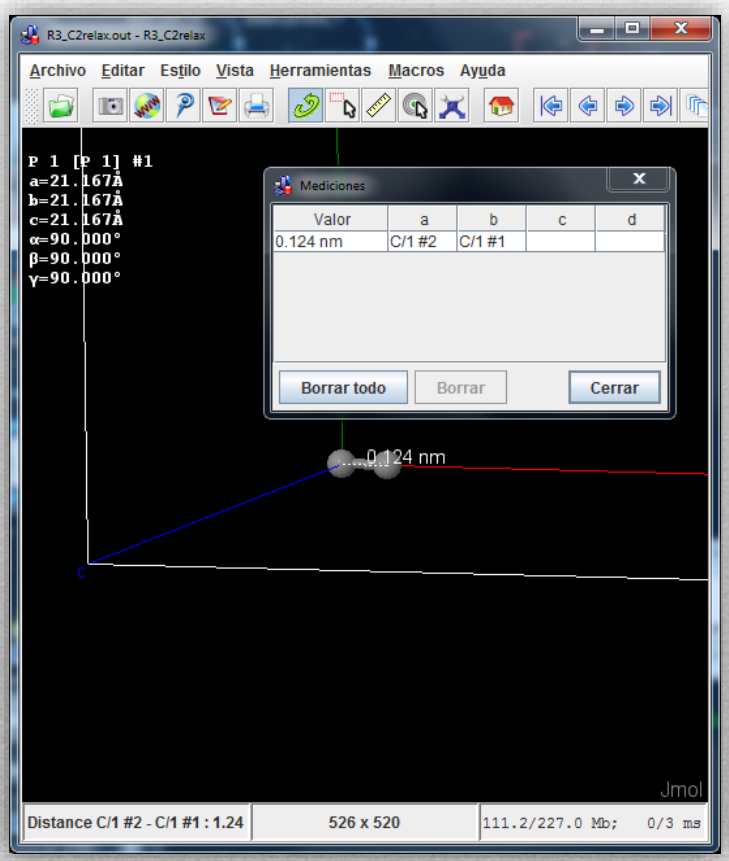
```
&CONTROL
  calculation      = 'scf',
  prefix           = 'C2',
  pseudo_dir       = './',
  outdir           = './tmp',
  tprnfor          = .true.
/
```

PseudoPotenciales Quantum

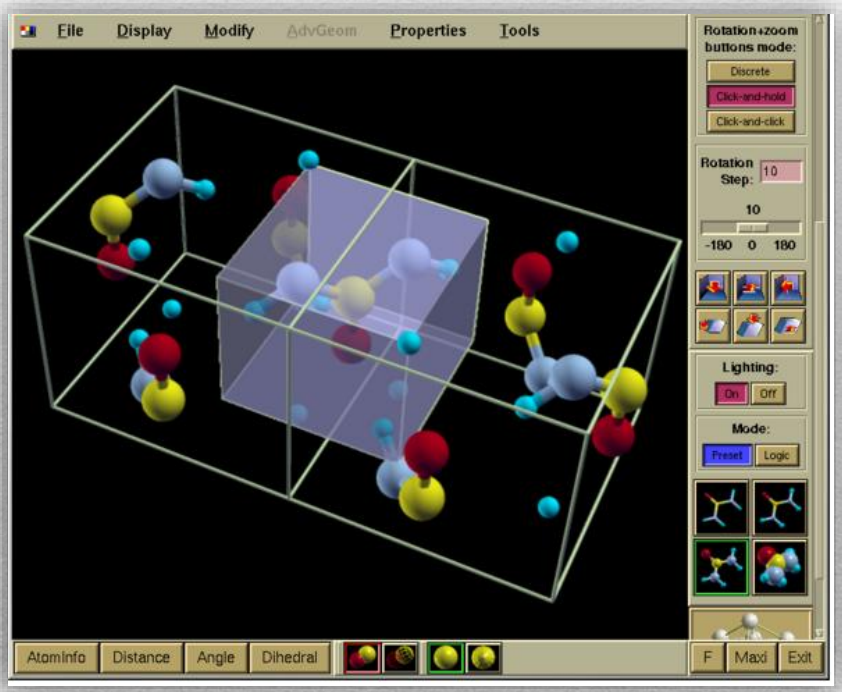


Visualizadores para QUANTUM

Jmol
An interactive viewer for three-dimensional chemical structures.



XCrySDen ...
X-window CRYstalline Structures and DENsities



Instalación de Aplicaciones

VISUALIZADORES

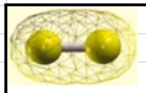
- XCrysDen
- Jmol (local)
- Diamon 3.0

Dinámicas Moleculares

```
&CONTROL
  calculation      = 'md',
  prefix           = 'C2',
  pseudo_dir       = './',
  outdir           = './tmp',
  tprnfor          = .true.
/
&SYSTEM
  ibrav            = 0,
  nat              = 2,
  ntyp             = 1,
  ecutwfc          = 100.D0,
  occupations      = 'smearing',
  smearing         = 'methfessel-paxton',
  degauss          = 0.05D0,
  nosym            = .true.
/
&ELECTRONS
  diagonalization = 'cg'
  conv_thr         = 1.0d-5
/
&IONS
  pot_extrapolation = 'second_order',
  wfc_extrapolation = 'second_order',
  ion_temperature   = 'rescaling',
  tempw = 77
/
ATOMIC_SPECIES
C   012.010   C.pz-rrkjus.UPF
ATOMIC_POSITIONS {angstrom}
C         0.000000000   0.000000000   0.000000000
C         1.240000000   0.000000000   0.000000000
K_POINTS {automatic}
2 2 1  0.5 0.5 0.5
CELL_PARAMETERS cubic
40.0  0.0  0.0
 0.0 40.0  0.0
 0.0  0.0 40.0
```

Determinación de energías y longitudes de enlace a diferentes temperaturas.

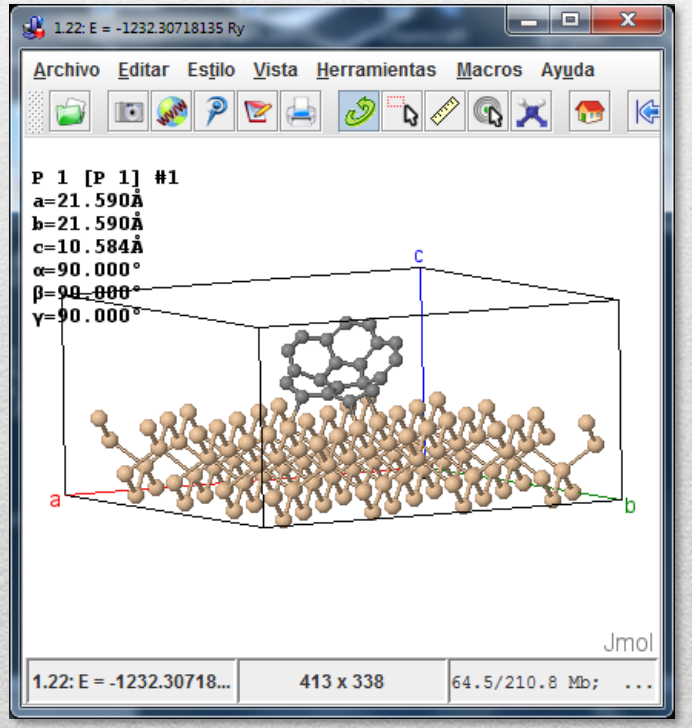
Ry	eV	keV
1	13.60569231	0.014

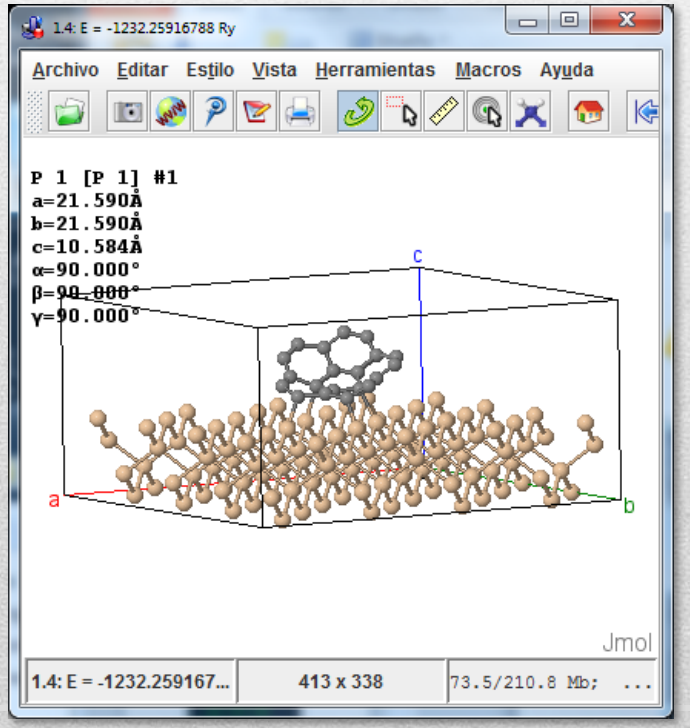


	Energía Total		Enlace
C2	Ry	eV	Å
A 0 K	-21.9759	-298.99727921	1.383
A 77 K	-22.0765	-300.36606628	1.256
A 300 K	-22.0766	-300.36742685	1.244

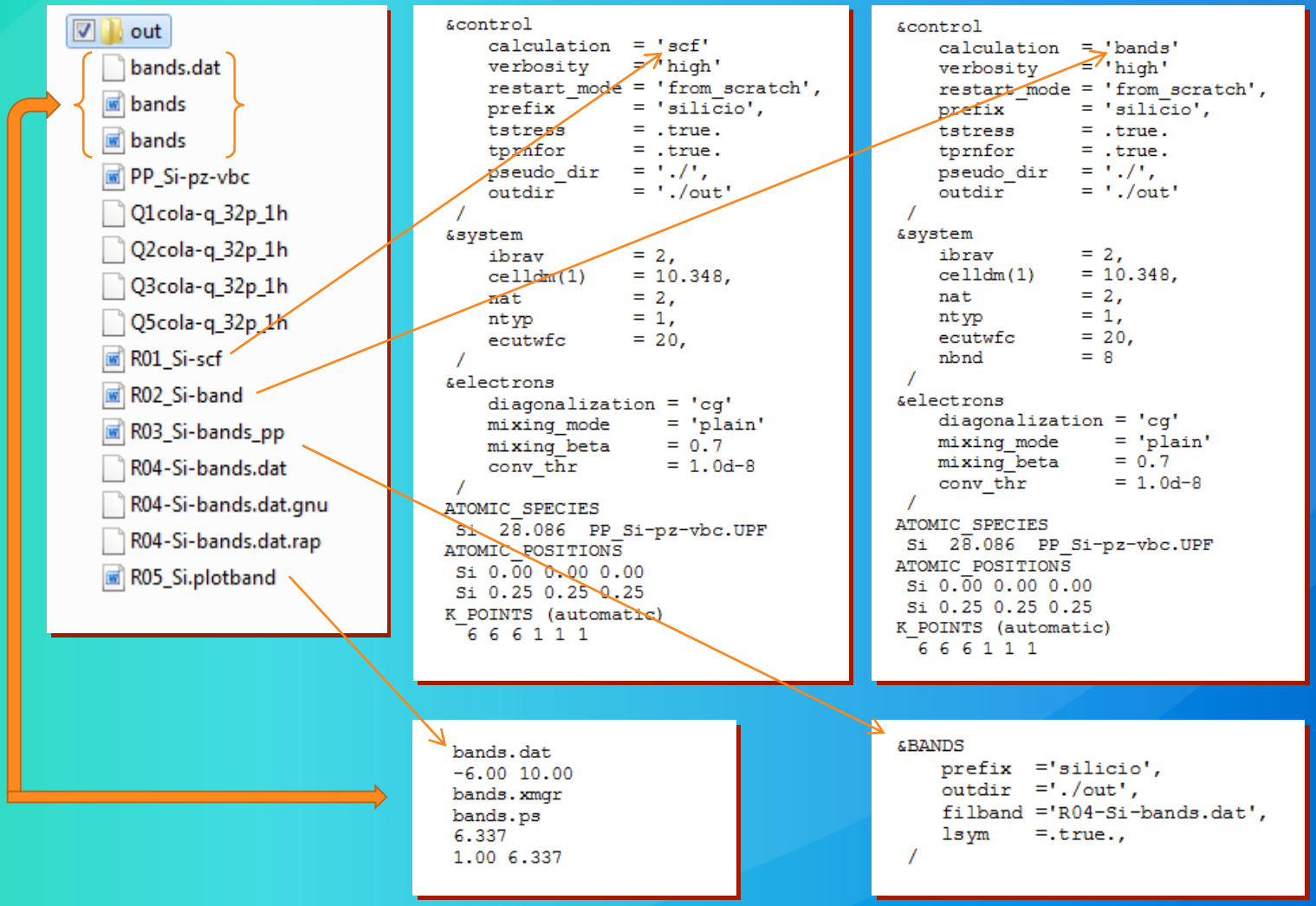
Visualización con Jmol

Jmol 14.4.0_2015.10.22b (2015-10-22 13:25)

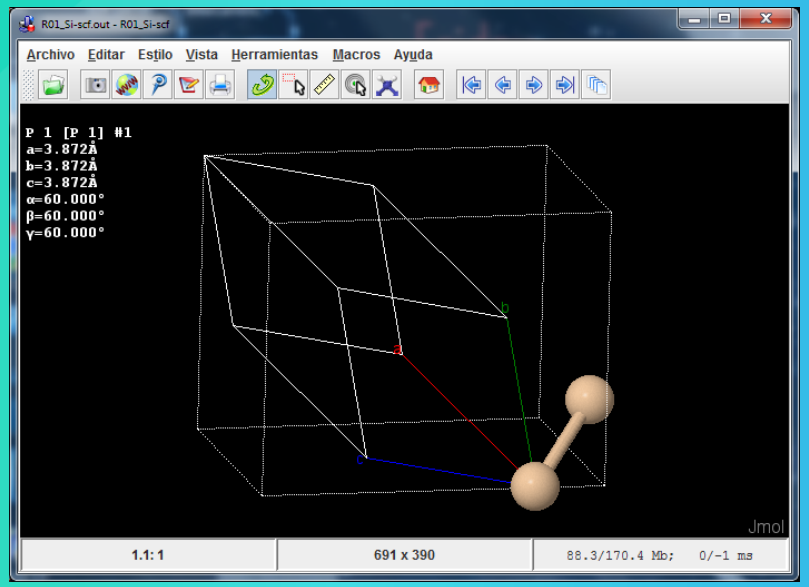


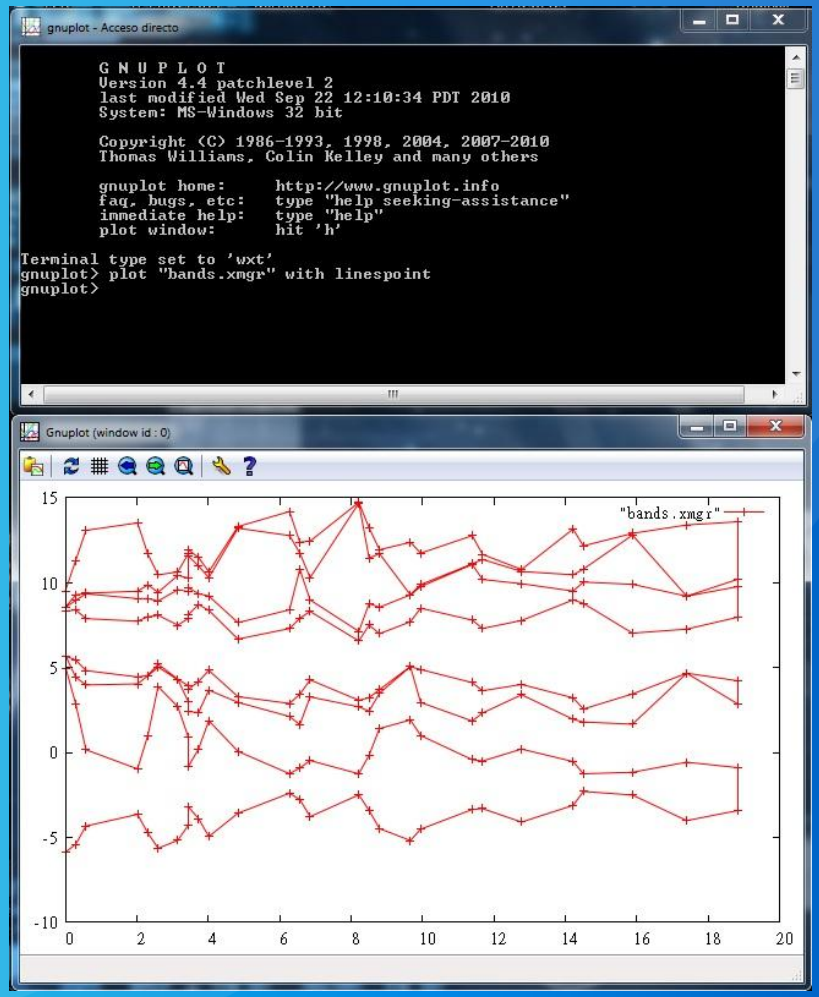


Cálculo de la Estructura de Bandas de un Cristal.

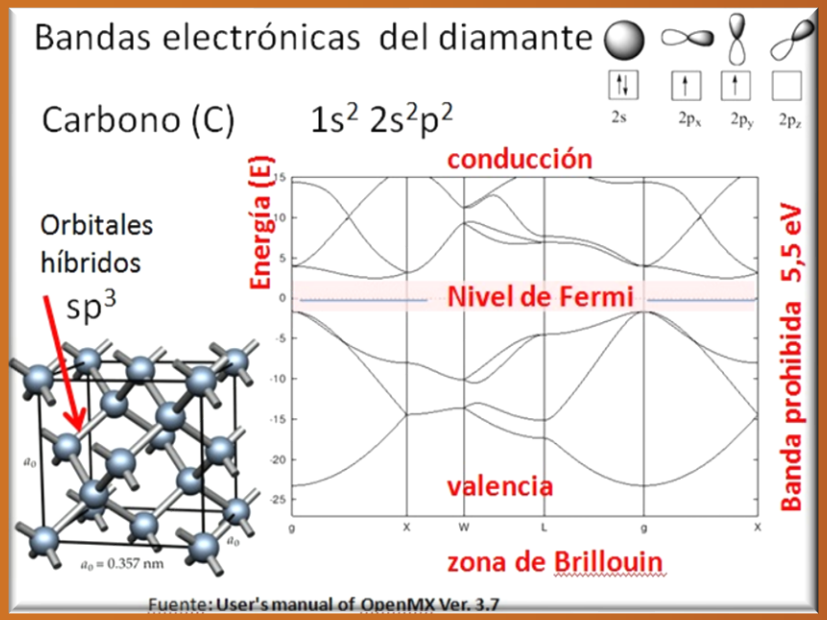


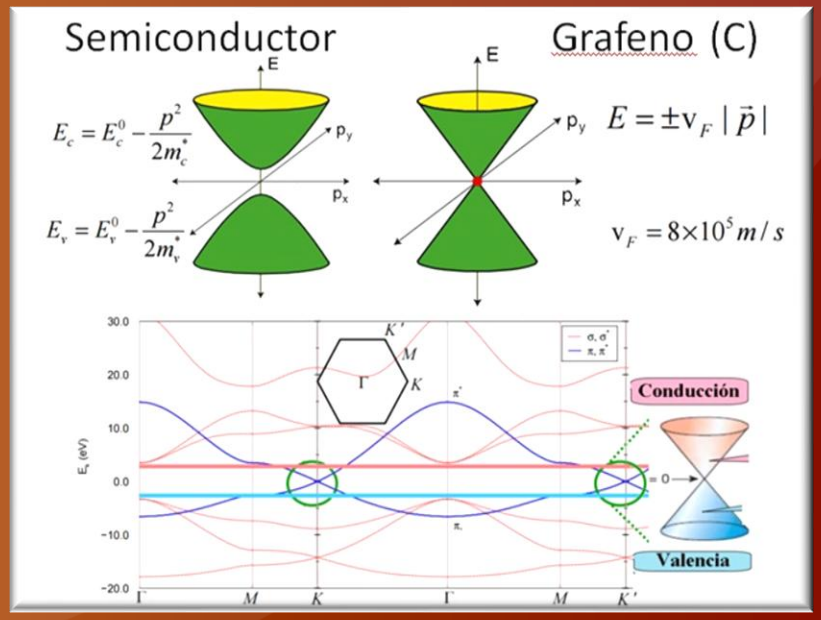
Cálculo de la Estructura de Bandas de un Cristal.





Tarea: Calcular la estructura de bandas para un cristal 2D de grafeno



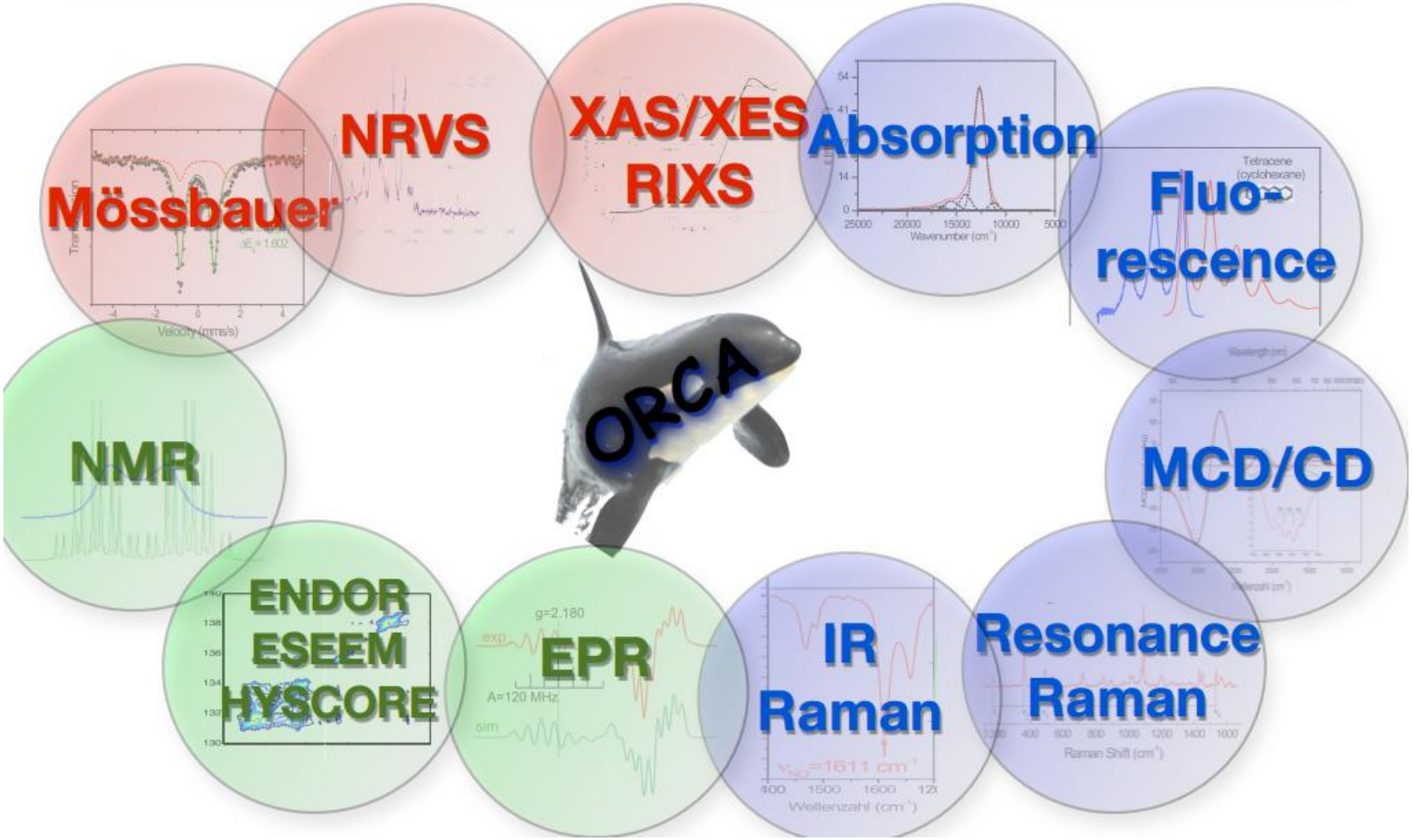


ORCA

An ab initio, DFT and semiempirical SCF-MO package Version 3.0.2

Max-Planck-Institute for Chemical Energy Conversion

Advanced Theoretical Spectroscopy with ORCA



Advanced Theoretical Spectroscopy with *ORCA*

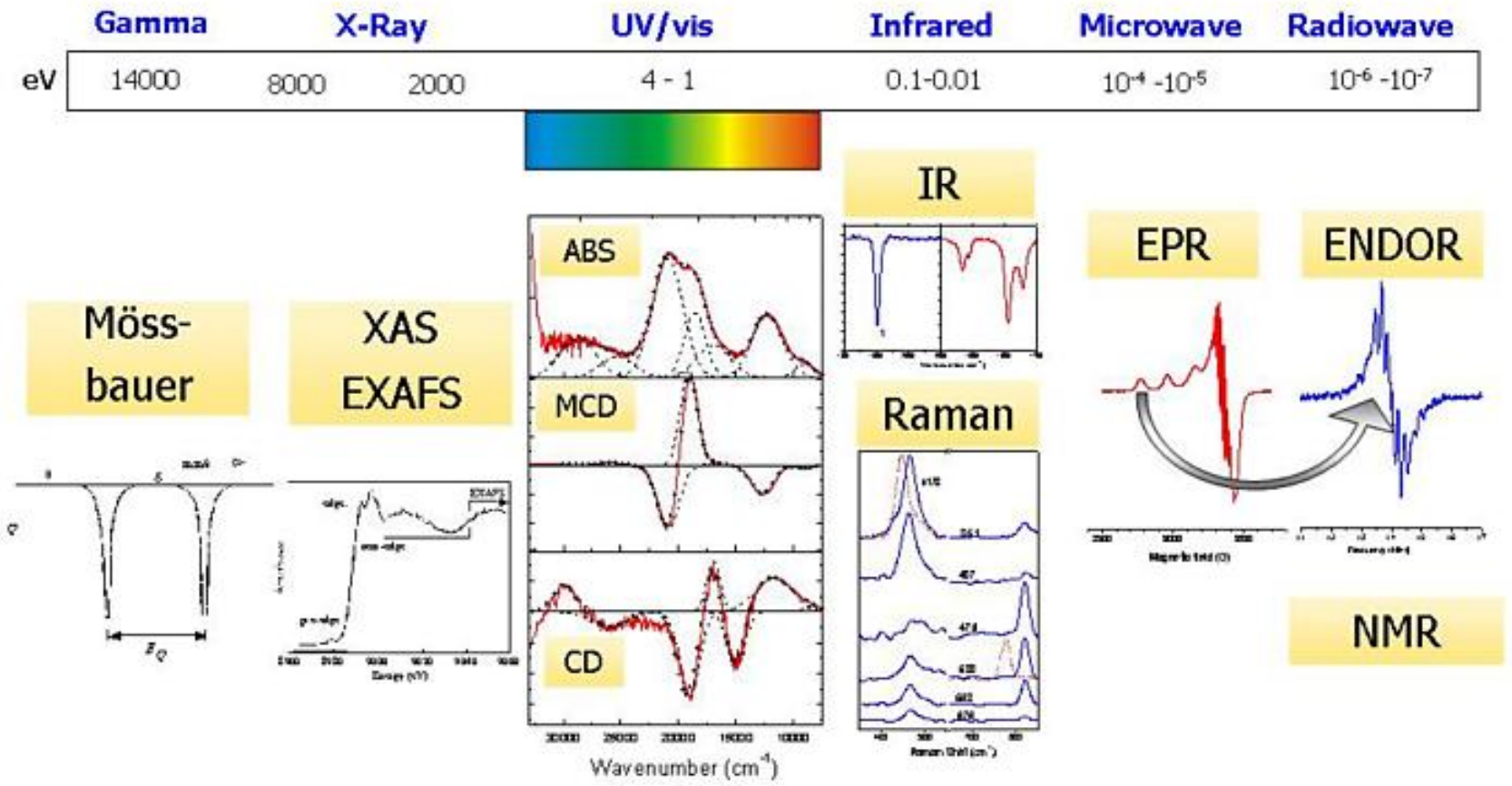
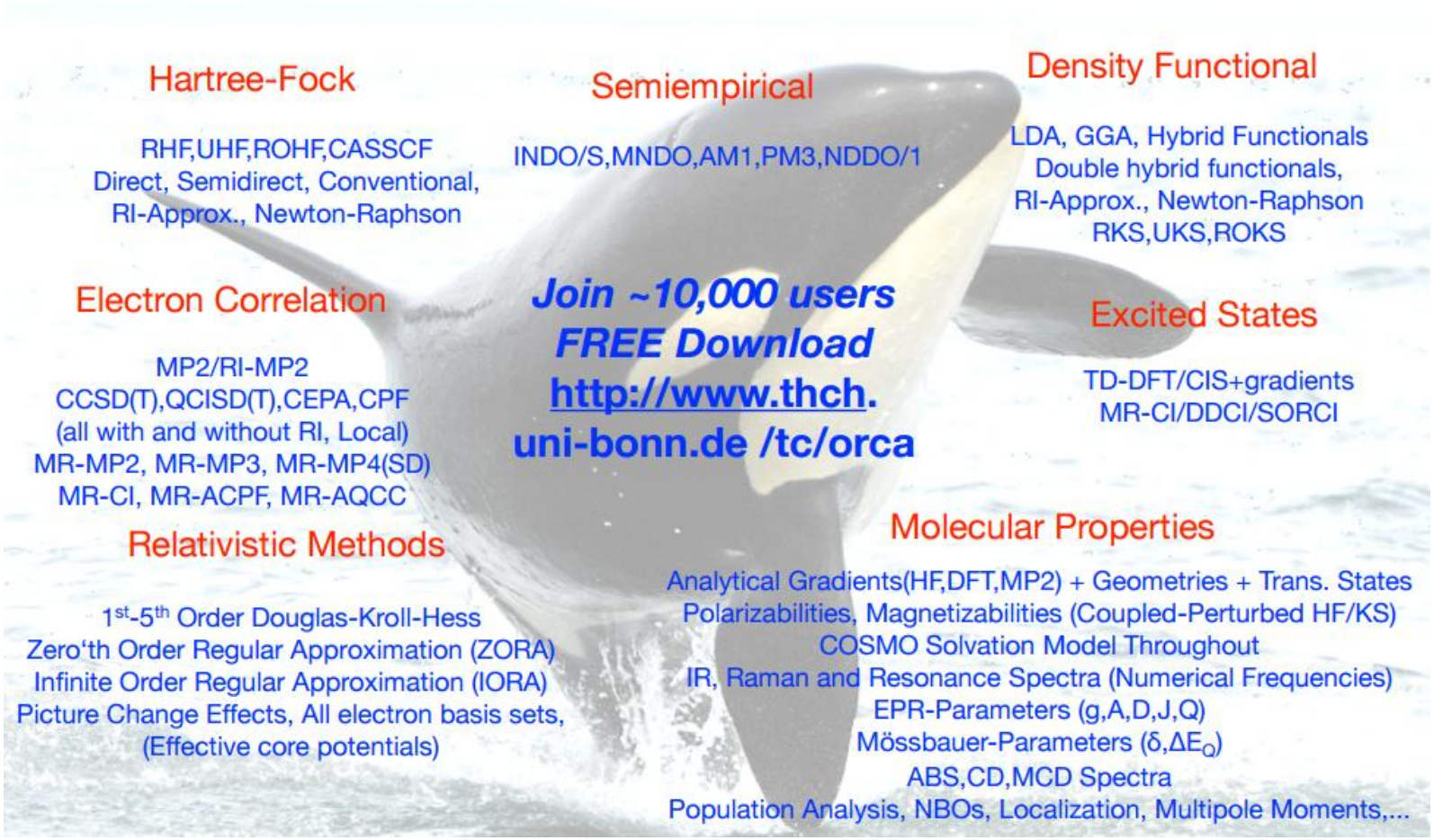
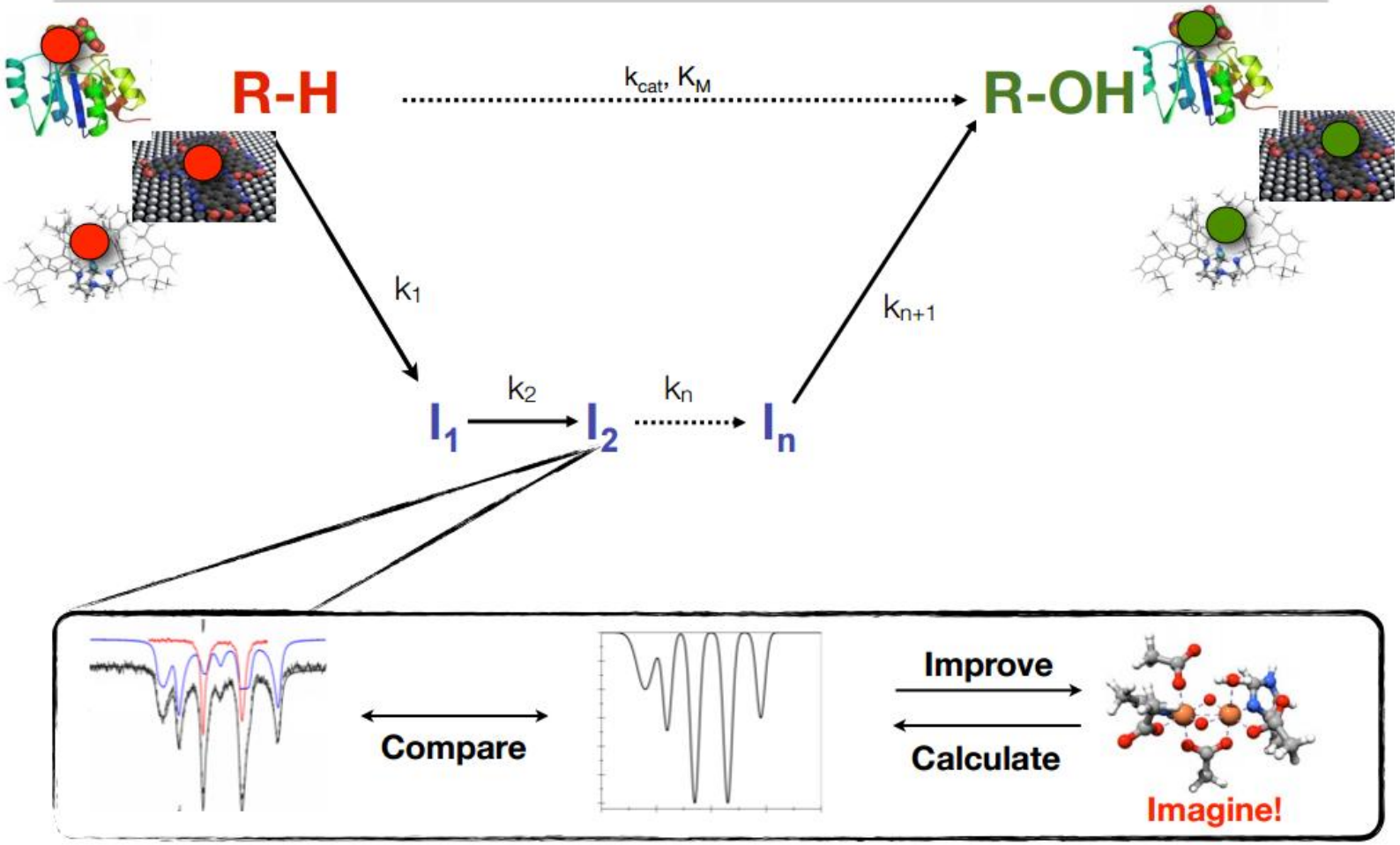


Figure 1: The energy scale of molecular spectroscopy.

The ORCA Project

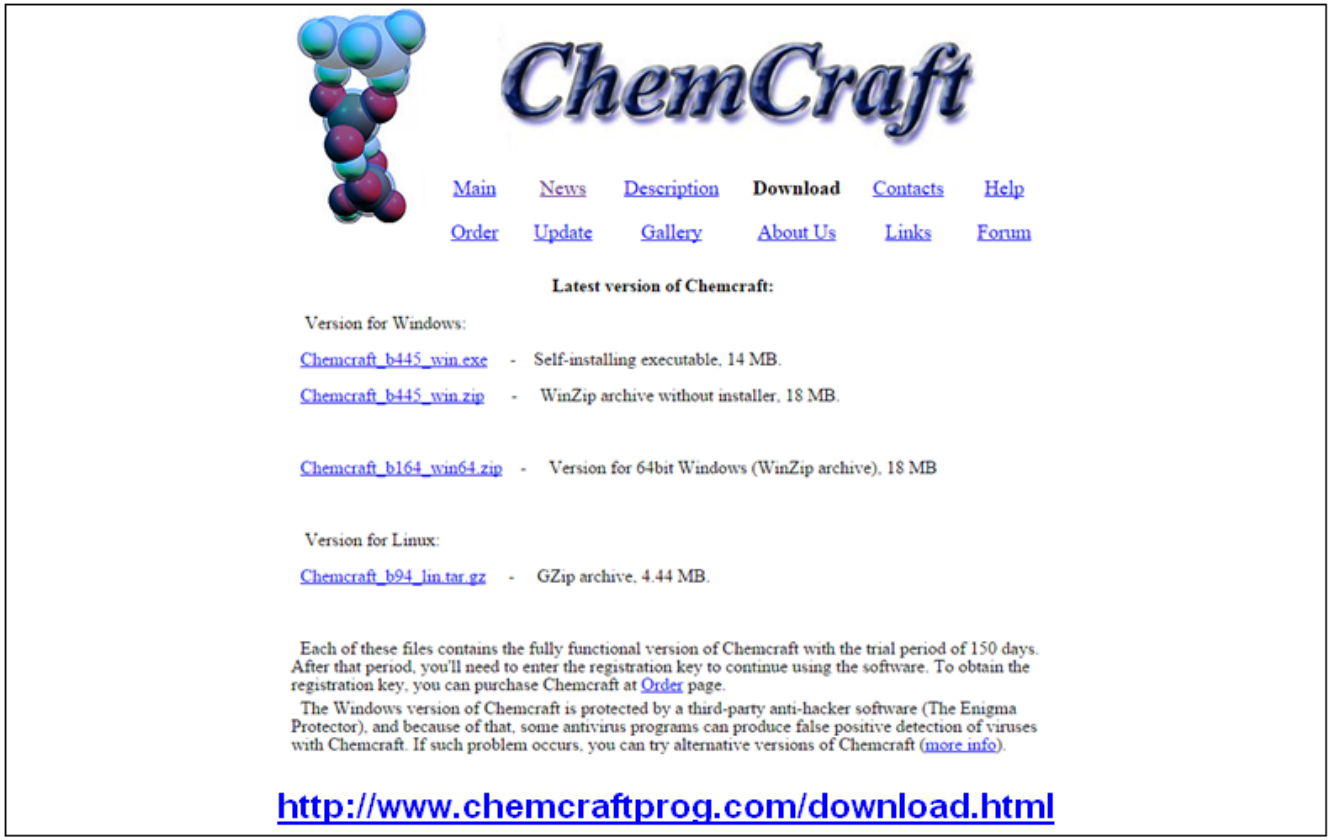


Mechanisms-Intermediates-Spectra-Calculations



1. Visualizadores

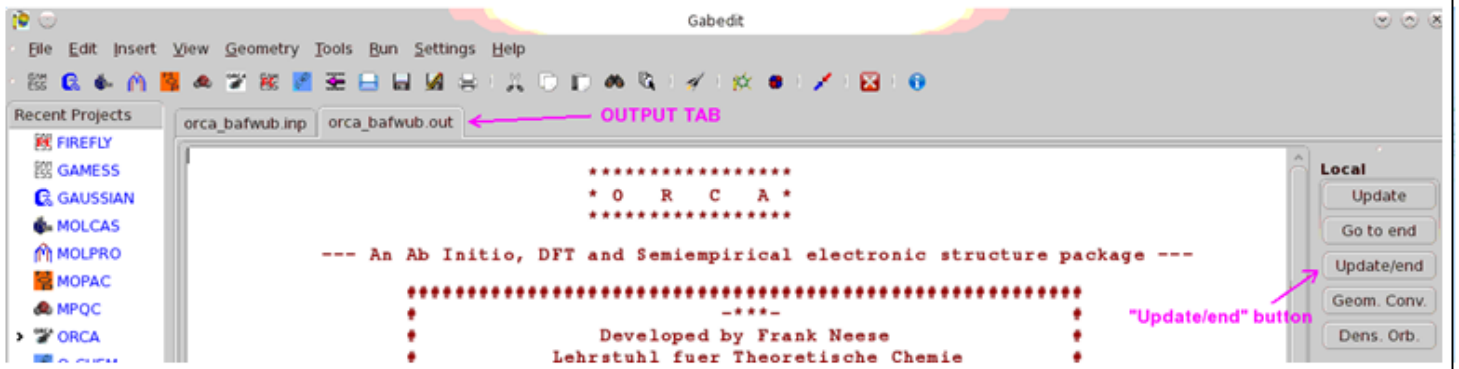
Resultará conveniente bajar e instalar el siguiente software para editar archivos ORCA y visualizar los resultados que se obtengan:



1. Visualizadores

Resultará conveniente bajar e instalar el siguientes software para editar archivos ORCA y visualizar los resultados que se obtengan:

Gabedit



http://www.sparkle.pro.br/tutorial/uv-vis

2 Ejecución de ORCA en paralelo

1. Para cargar el módulo de procesamiento en paralelo ORCA 3.0.2 en Miztli, se debe escribir en la línea de comandos de una terminal ssh:

```
module load orca
```

2. Para procesar un archivo con de entrada con información molecular, se debe crear un script en un archivo de texto sin formato (con una lista de órdenes a ejecutar secuenciadas) para enviar a una cola de procesos determinada el archivo de entrada orca. Puede basarse en el siguiente ejemplo:

```
#!/bin/bash
#BSUB -oo ARCHIVO.stdout
#BSUB -eo ARCHIVO.err
#BSUB -q COLA
#BSUB -n NUMPROC
/opt/SC/aplicaciones/orca-3.0.2/orca ARCHIVO.inp >& ARCHIVO.out
```

Donde ARCHIVO, es el nombre de su archivo de entrada o input, COLA, es la cola a donde enviará su trabajo, dependiendo de los recursos a solicitar y NUMPROC es el número de procesadores que solicita que además debe corresponder a la cola.

El script se puede llamar ARCHIVO.joborca o de cualquier otra forma

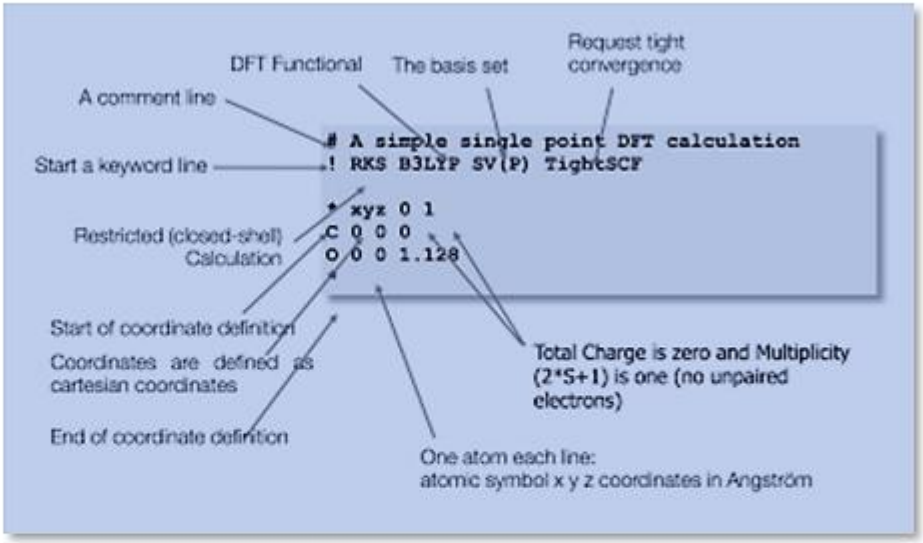
3. Enviar el trabajo a procesar.

```
bsub < ARCHIVO.joborca ↵
```

Nota: el símbolo ↵ representa a la tecla **[ENTER]**.

3 General structure of the input file

In general, the input file is a free format ASCII file.



Comments in the file start by a '#'. For example:

 # This is a comment. Goes until the end of the line

Comments can also be closed by a second '#'. For example:

TolE=1e-5; #Energy conv.# TolMaxP=1e-6; #Density conv.#

4 Examples for input files

In this section you will find some simple input examples. A much more comprehensive description of the program's capabilities is found in the user manual.

Parámetros Hartree-Fock:

- RHF/UHF: (spin-Restricted Hartree-Fock/unrestricted Hartree-Fock) determina el tipo de función de onda seleccionado para el cálculo. La aproximación RHF implica que en cada orbital ocupado residan electrones apareados; se usa generalmente para describir estados singulete de capa cerrada. Por el contrario, el método UHF es adecuado para describir tanto sistemas de capa abierta como de capa cerrada. Este método resulta necesario para estudiar la disociación homolítica de sistemas moleculares, proceso éste que no puede ser descrito correctamente a nivel RHF. Un cálculo UHF requiere más tiempo de cálculo que uno RHF.

Orca1.inp

The first trivial calculation is a simple restricted Hartree-Fock SCF calculation on the CO molecule:

```
# My first ORCA calculation :-)

! HF SVP

* xyz 0 1
C 0.0 0.0 0.0
O 0.0 0.0 1.13
*
```

Orca1.inp

The first trivial calculation is a simple restricted Hartree-Fock SCF calculation on the CO molecule:

```
# My first ORCA calculation :-)

! HF SVP

* xyz 0 1
C 0.0 0.0 0.0
O 0.0 0.0 1.13
*
```

Orca2.inp

We can run a spin-unrestricted calculation on the cation and ask for tight SCF convergence:

```
# Unrestricted Hartree-Fock single point calculation with tight SCF convergence criteria

! UHF SVP TightSCF

* xyz 1 2
C 0.0 0.0 0.0
O 0.0 0.0 1.13
*
```

Orca3.inp

Now let's get a bit more serious and run a geometry optimization on some organic molecule at the B3LYP level. The program automatically generates internal coordinates and carries out the optimization in them.

```
# Test redundant internal optimization
! RKS B3LYP SVP Opt TightSCF SmallPrint
* xyz 0 1
C -1.48746  -0.02867   -0.00006
O  0.37634   0.02867   -0.00006
H -1.81891  -1.06706   -0.00006
H -1.86647   0.47370    0.88993
H -1.86647   0.47370   -0.89004
H  0.75672  -0.95001   -0.00006
*
```

Orca4.inp

It is a little bit more challenging to do calculations on transition metal complexes. Let us optimize the structure of $[Fe(H_2O)6]^{3+}$ (S=5/2) and use the very efficient RI approximation to reduce the computation time.

```
# Geometry optimization of [Fe(H2O)6]3+ employing DFT
# The RI approximation is used
# The SV(P) basis set was replaced by the TZVPP basis set for iron
! UKS BP SV(P) SV/J OPT Split-RI-J
%basis NewGTO 26 "TZVPP" end
NewAuxGTO 26 "TZV/J" end
end
* xyz 3 6
Fe 0.000047 -0.000114 0.000013
O -0.199873 1.108797 1.733279
H 0.380320 1.865880 2.020956
O -1.236638 1.328040 -0.990513
H -1.665421 2.138758 -0.601345
O -1.643746 -1.133837 0.535682
H -2.594241 -0.943118 0.306097
O 0.198381 -1.109845 -1.732630
H 0.891437 -0.986937 -2.437690
O 1.238604 -1.327482 0.989961
H 1.513573 -1.279077 1.946292
O 1.643403 1.134541 -0.535766
H 2.593848 0.945769 -0.304430
H -1.516941 1.276571 -1.945157
H 1.632468 1.972748 -1.074090
H -0.894758 0.986836 2.436707
H 1.671714 -2.135426 0.599824
H -0.383130 -1.865932 -2.020344
H -1.633554 -1.973176 1.072267
*
```

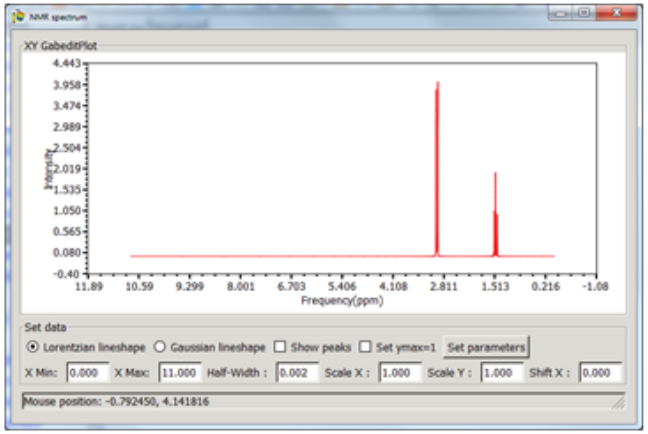
Orca5.inp

Let us predict properties – here we calculate the EPR parameters for an organic radical anion.

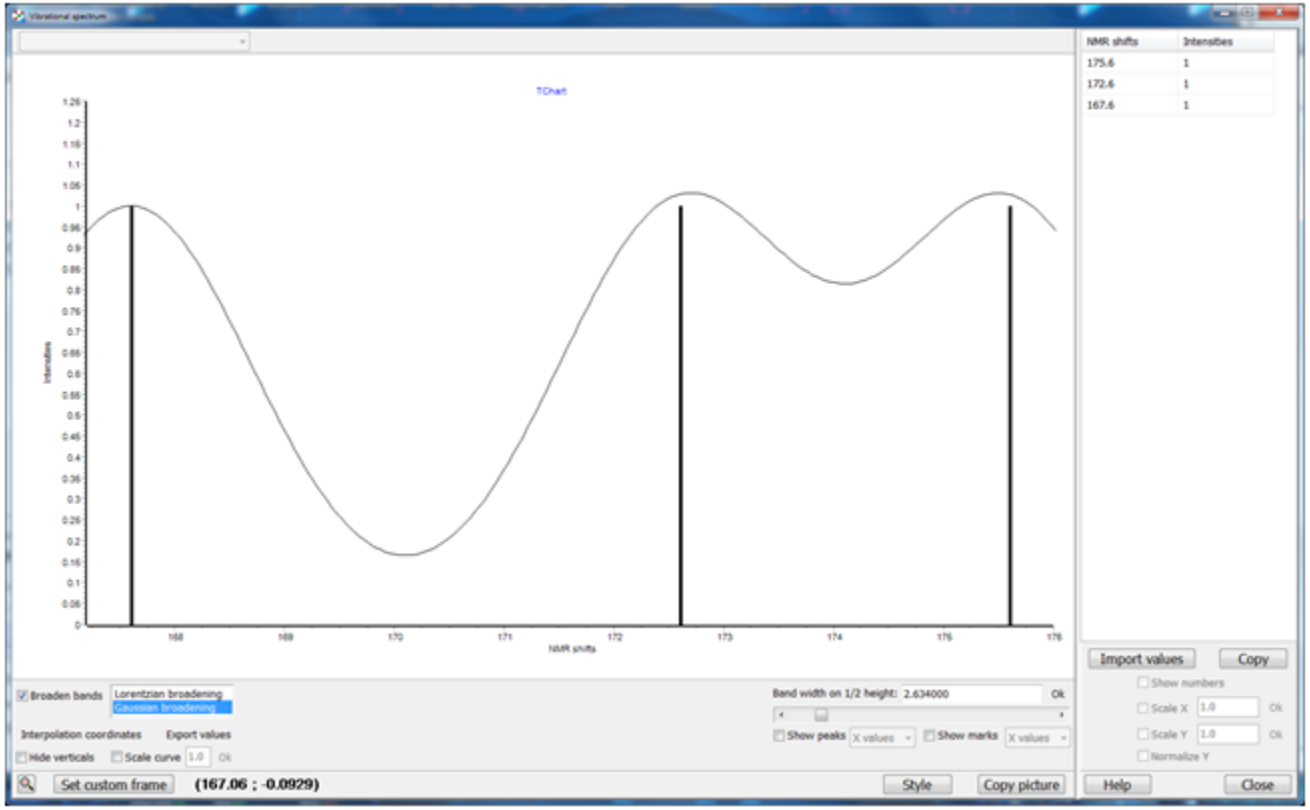
Electron paramagnetic resonance (EPR) or electron spin resonance (ESR) spectroscopy is a technique for studying materials with unpaired electrons. The basic concepts of EPR are analogous to those of nuclear magnetic resonance (NMR), but it is electron spins that are excited instead of the spins of atomic nuclei. EPR spectroscopy is particularly useful for studying metal complexes or organic radicals.

```
#
# g-tensor Calculation for an organic radical anion
#
! UKS BP SV(P) TightSCF Grid4 NoFinalGrid Direct
* xyz -1 2
c 1.672238 -1.264072 0.009796
c 0.335031 -0.940361 -0.075605
c -0.121366 0.436182 -0.112778
c 0.914606 1.448908 -0.053979
c 2.251894 1.127195 0.031094
c 2.719187 -0.252390 0.069099
h 1.997766 -2.304445 0.036564
h -0.429413 -1.716578 -0.118243
o -1.362987 0.753407 -0.193423
h 0.584162 2.487790 -0.081799
h 3.017076 1.903066 0.073644
o 3.953182 -0.551604 0.148612
c -4.499185 0.039361 0.381896
h -5.467065 -0.483352 0.380119
h -4.646728 1.027796 -0.090897
h -4.211445 0.216196 1.434546
o -3.563523 -0.755664 -0.309212
h -2.692156 -0.268520 -0.298882
*
%eprnmr gtensor 1
end
```

Visualice la Gráfica NMR en Gabedit:

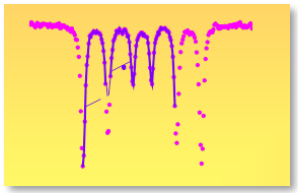


Con Chemcraft:



Agradecimientos

Dra. Vivianne Marquina
Responsable de proyecto
Lab. de Física Atómica y Molecular
Facultad de Ciencias, UNAM.



Gracias por participar

QUÍMICA COMPUTACIONAL